

19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 749 324**

51 Int. Cl.:

C08L 69/00 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **24.07.2012 PCT/US2012/047967**

87 Fecha y número de publicación internacional: **31.01.2013 WO13016331**

96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **24.07.2012 E 12817815 (9)**

97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **10.07.2019 EP 2736974**

54 Título: **Composiciones poliméricas y métodos**

30 Prioridad:

25.07.2011 US 201161511543 P

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

19.03.2020

73 Titular/es:

SAUDI ARAMCO TECHNOLOGIES COMPANY

(100.0%)

P.O. Box 62

Dhahran 31311, SA

72 Inventor/es:

ALLEN, SCOTT, D. y

WILLKOMM, WAYNE, R.

74 Agente/Representante:

ELZABURU, S.L.P

ES 2 749 324 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

Composiciones poliméricas y métodos

Referencia cruzada con las solicitudes relacionadas

5 La presente solicitud reivindica la prioridad de la solicitud de patente estadounidense provisional núm. 61/511.543, presentada el 25 de julio de 2011.

Soporte gubernamental

La presente invención se realizó con el apoyo del gobierno de Estados Unidos con la subvención DE-FE0002474, otorgada por el Departamento de Energía. El Gobierno de Estados Unidos posee ciertos derechos en la invención.

Campo de la invención

10 El documento WO 2010/115567 A1 se refiere a poliuretano, y específicamente a elastómeros microcelulares de poliuretano (p.1, 1.1-3). De acuerdo con p.2-p.3, el elastómero microcelular de poliuretano comprende el producto de reacción de: a) un prepolímero terminado en isocianato, en donde dicho prepolímero terminado en isocianato es un producto de reacción de un isocianato y un primer poliol; b) un segundo poliol; y c) un extensor de cadena que tiene pesos moleculares promedio inferiores o iguales a 800; en donde dichos primer poliol y/o segundo poliol
15 comprende(n) por lo menos un poliol obtenido sometiendo a reacción dióxido de carbono con óxido de alqueno que tiene una fórmula que satisface los requerimientos de la reivindicación 1 de la presente solicitud. La Tabla 1 muestra 2-4 prepolímeros ilustrativos preparados a partir de poliol de policarbonato con un poliol de poliéster. Dichos prepolímeros se usan para someter a reacción con una mezcla secundaria A para elaborar un elastómero de poliuretano.

20 La presente invención se refiere al campo de una mezcla secundaria B para la formulación de espuma microcelular o composiciones elastoméricas que incorporan polioles de policarbonato alifático que tienen un alto porcentaje de grupos terminales -OH.

Compendio de la invención

25 En un aspecto, la presente invención abarca una mezcla secundaria B para la formulación de composiciones de espuma microcelular o para la formulación de composiciones elastoméricas como se define en la reivindicación 1.

En determinadas realizaciones, dichas cadenas de policarbonato alifáticas derivan de la copolimerización de dióxido de carbono con uno o más sustratos de epóxido. Dichas copolimerizaciones se describen y ejemplifican en la solicitud PCT publicada WO/2010/028362. En algunas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifáticas derivan de óxido de etileno, óxido de propileno u opcionalmente de epóxidos alifáticos C₃₋₃₀ sustituidos, o mezclas de dos o
30 más de estos. En determinadas realizaciones, los polioles de policarbonato alifático tienen un número funcional entre aproximadamente 1,8 y aproximadamente 6.

En otro aspecto, la presente invención abarca composiciones de uretano derivadas de una mezcla secundaria B de acuerdo con la invención según se define en la reivindicación 13.

35 En otro aspecto, la presente invención abarca el uso de una mezcla secundaria B para la formulación de una composición de espuma microcelular o composición elastomérica como se define en la reivindicación 14.

Definiciones

Las definiciones de grupos funcionales específicos y términos químicos se describen en más detalle a continuación. Para los propósitos de la presente invención, los elementos químicos se identifican de acuerdo con la Tabla Periódica de los Elementos, versión CAS, Handbook of Chemistry and Physics, 75^a Ed., portada interior, y los grupos
40 funcionales específicos se definen en general como se describe en este documento. Además, se describen principios generales de química orgánica, así como también de restos funcionales y reactividad específicos, en Organic Chemistry, Thomas Sorrell, University Science Books, Sausalito, 1999; Smith and March March's Advanced Organic Chemistry, 5^a Edición, John Wiley & Sons, Inc., Nueva York, 2001; Larock, Comprehensive Organic Transformations, VCH Publishers, Inc., Nueva York, 1989; Carruthers, Some Modern Methods of Organic
45 Synthesis, 3^a Edición, Cambridge University Press, Cambridge, 1987.

Ciertos compuestos de la presente invención pueden comprender uno o más centros asimétricos, y por lo tanto existir en distintas formas estereoisoméricas, p. ej., enantiómeros y/o diastereómeros. Por lo tanto, los compuestos inventivos y sus composiciones pueden estar en la forma de un enantiómero, diastereómero o isómero geométrico individual, y pueden estar en la forma de una mezcla de estereoisómeros. En determinadas realizaciones, los
50 compuestos de la invención son compuestos enantiopuros. En determinadas realizaciones, se dan a conocer mezclas de enantiómeros o diastereómeros.

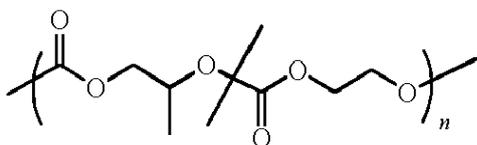
Asimismo, ciertos compuestos, tal como se describen en este documento, pueden tener uno o más dobles enlaces que pueden existir o bien como el isómero Z o E, a menos que se indique algo distinto. La invención abarca también los compuestos como isómeros individuales sustancialmente libres de otros isómeros y alternativamente, como mezclas de varios isómeros, p. ej., mezclas racémicas de enantiómeros. Además de los compuestos anteriormente mencionados *per se*, la presente invención también abarca composiciones que comprenden uno o más compuestos.

Tal como se emplea en este documento, el término "isómeros" incluye todos y cada uno de los isómeros geométricos y estereoisómeros. Por ejemplo, "isómeros" incluye isómeros *cis* y *trans*, isómeros *E* y *Z*, enantiómeros *R* y *S*, diastereómeros, isómeros (D), isómeros (L), sus mezclas racémicas y otras de sus mezclas, dentro del alcance de la invención. Por ejemplo, un estereoisómero puede, en algunas realizaciones, proveerse sustancialmente libre de uno o más estereoisómeros correspondientes, y puede además denominarse "estereoquímicamente enriquecido".

Si se prefiere un enantiómero particular, puede, en algunas realizaciones, proveerse sustancialmente libre del enantiómero opuesto, y puede además denominarse "ópticamente enriquecido". "Ópticamente enriquecido", tal como se emplea en este documento, significa que el compuesto o polímero está hecho de una proporción significativamente menor de un enantiómero. En determinadas realizaciones, el compuesto está hecho de por lo menos aproximadamente 90% en peso de un enantiómero preferido. En otras realizaciones, el compuesto está hecho de por lo menos aproximadamente 95%, 98% o 99% en peso de un enantiómero preferido. Los enantiómeros preferidos se pueden aislar de mezclas racémicas mediante cualquier método conocido en la técnica, incluidos cromatografía de líquidos de alta presión quirales (HPLC) y la formación y cristalización de sales quirales o preparadas por síntesis asimétricas. Ver, por ejemplo, Jacques, et al., *Enantiomers, Racemates and Resolutions* (Wiley Interscience, Nueva York, 1981); Wilen, S.H., et al., *Tetrahedron* 33:2725 (1977); Eliel, E.L. *Stereochemistry of Carbon Compounds* (McGraw-Hill, NY, 1962); Wilen, S.H. *Tables of Resolving Agents and Optical Resolutions* pág. 268 (E.L. Eliel, Ed., Univ. of Notre Dame Press, Notre Dame, IN 1972).

El término "epóxido", tal como se emplea en esta memoria, se refiere a un oxirano sustituido o insustituido. Dichos oxiranos sustituidos incluyen oxiranos monosustituidos, oxiranos disustituidos, oxiranos trisustituidos y oxiranos tetrasustituidos. Dichos epóxidos pueden además estar opcionalmente sustituidos como se define en este documento. En determinadas realizaciones, los epóxidos comprenden un solo resto oxirano. En determinadas realizaciones, los epóxidos comprenden dos o más restos oxirano.

El término "polímero", tal como se emplea en esta memoria, se refiere a una molécula de alta masa molecular relativa, cuya estructura comprende la repetición múltiple de unidades derivadas, real o conceptualmente, de moléculas de baja masa molecular relativa. En determinadas realizaciones, un polímero está comprendido por unidades sustancialmente alternantes derivadas de CO₂ y un epóxido (p. ej., poli(etilencarbonato)). En determinadas realizaciones, un polímero de la presente invención es un copolímero, terpolímero, heteropolímero, copolímero en bloque o heteropolímero cónico que incorpora dos o más monómeros de epóxido diferentes. Con respecto a la ilustración estructural de dichos polímeros superiores, la convención de exhibir encadenamiento de unidades monoméricas diferentes separadas por un guión se puede utilizar en este documento



Se ha de interpretar que estas estructuras abarcan copolímeros que incorporan cualquier relación de diferentes unidades monoméricas, a menos que se especifique algo distinto. Esta ilustración también tiene como fin representar copolímeros en bloque, aleatorios, cónicos y combinaciones de cualquiera de dos o más de estos, y se implica a todos ellos, a menos que se especifique otra cosa.

Los términos "halo" y "halógeno", tal como se emplean en este documento, se refieren a un átomo seleccionado entre flúor (fluoro, -F), cloro (cloro, -Cl), bromo (bromo, -Br) e yodo (yodo, -I).

El término "alifático" o la expresión "grupo alifático", tal como se emplea en este documento, ilustra un resto hidrocarbonado que puede ser de cadena lineal (es decir, no ramificado), ramificado o cíclico (incluido policíclico condensado, en puente y espiro-condensado) y puede estar completamente saturado o puede contener una o más unidades de insaturación, pero que no es aromático. A menos que se especifique otra cosa, los grupos alifáticos contienen 1-40 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alifáticos contienen 1-20 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alifáticos contienen 3-20 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alifáticos contienen 1-12 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alifáticos contienen 1-8 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alifáticos contienen 1-6 átomos de carbono. En algunas realizaciones, los grupos alifáticos contienen 1-5 átomos de carbono, en algunas realizaciones, los grupos alifáticos contienen 1-4 átomos de carbono, en algunas realizaciones, los grupos alifáticos contienen 1-3 átomos de carbono, y en algunas realizaciones los grupos alifáticos contienen 1 o 2 átomos de

carbono. Los grupos alifáticos adecuados incluyen, aunque sin limitarse a ello, grupos alquilo, alquenilo y alquinilo lineales o ramificados, y sus híbridos tales como (cicloalquil)alquilo, (cicloalquenil)alquilo o (cicloalquil)alquenilo.

5 El término "heteroalifático", tal como se emplea en esta memoria, se refiere a grupos alifáticos en los que uno o más átomos de carbono se reemplazan en forma independiente por uno o más átomos seleccionados del grupo que consiste en oxígeno, azufre, nitrógeno o fósforo. En determinadas realizaciones, se reemplazan en forma independiente uno o más de oxígeno, azufre, nitrógeno o fósforo. Los grupos heteroalifáticos pueden ser grupos sustituidos o insustituidos, ramificados o no ramificados, cíclicos o acíclicos, e incluyen grupos saturados, insaturados o parcialmente insaturados.

10 Tal como se emplea en esta memoria, la expresión "cadena hidrocarbonada bivalente C₁₋₈ (o C₁₋₃) saturada o insaturada, lineal o ramificada", se refiere a cadenas alquilo, alquenilo y alquinilo bivalentes, lineales o ramificadas como se define en este documento.

El término "insaturado", tal como se emplea en esta memoria, significa que un resto tiene uno o más dobles o triples enlaces.

15 Los términos "cicloalifático", "carbociclo" o "carbocíclico", utilizados solos o como parte de un resto más grande, se refieren a sistemas de anillos saturados o parcialmente insaturados cíclicos, alifáticos, monocíclicos o policíclicos como se describe en este documento, que tienen entre 3 y 12 miembros, en donde el sistema de anillos alifáticos está opcionalmente sustituido como se definió anteriormente y como se describe en este documento. Los grupos cicloalifáticos incluyen, entre otros, ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclopentenilo, ciclohexilo, ciclohexenilo, cicloheptilo, cicloheptenilo, ciclooctilo, ciclooctenilo, norbornilo, adamantilo y ciclooctadienilo. En algunas realizaciones, el cicloalquilo tiene 3-6 carbonos. Los términos "cicloalifático", "carbociclo" o "carbocíclico" también incluyen anillos alifáticos que se condensan a uno o más anillos aromáticos o no aromáticos, como decahidronaftilo o tetrahidronaftilo, en donde el radical o punto de sujeción está en el anillo alifático. En determinadas realizaciones, la expresión "carbociclo de 3 a 7 miembros" se refiere a un anillo carbocíclico monocíclico de 3 a 7 miembros saturado o parcialmente insaturado. En determinadas realizaciones, el término "carbociclo de 3 a 8 miembros" se refiere a un anillo carbocíclico monocíclico de 3 a 8 miembros saturado o parcialmente insaturado. En determinadas realizaciones, las expresiones "carbociclo de 3 a 14 miembros" y "carbociclo C₃₋₁₄" se refieren a un anillo carbocíclico, monocíclico de 3 a 8 miembros, saturado o parcialmente insaturado, o un anillo carbocíclico policíclico de 7 a 14 miembros, saturado o parcialmente insaturado.

30 El término "alquilo", tal como se emplea en esta memoria, se refiere a radicales hidrocarbonados saturados, de cadena lineal o ramificada derivados de un resto alifático que contiene entre uno y seis átomos de carbono por eliminación de un átomo de hidrógeno sencillo. A menos que se especifique otra cosa, los grupos alquilo contienen 1-12 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alquilo contienen 1-8 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alquilo contienen 1-6 átomos de carbono. En algunas realizaciones, los grupos alquilo contienen 1-5 átomos de carbono, en algunas realizaciones, los grupos alquilo contienen 1-4 átomos de carbono, en algunas realizaciones los grupos alquilo contienen 1-3 átomos de carbono, y en algunas realizaciones, los grupos alquilo contienen 1-2 átomos de carbono. Los ejemplos de radicales alquilo incluyen, entre otros, metilo, etilo, n-propilo, isopropilo, n-butilo, iso-butilo, sec-butilo, sec-pentilo, iso-pentilo, terc-butilo, n-pentilo, neopentilo, n-hexilo, sec-hexilo, n-heptilo, n-octilo, n-decilo, n-undecilo y dodecilo.

40 El término "alquenilo", tal como se emplea en este documento, ilustra un grupo monovalente derivado de un resto alifático de cadena lineal o ramificada que tiene por lo menos un doble enlace carbono-carbono por eliminación de un átomo de hidrógeno sencillo. A menos que se especifique otra cosa, los grupos alquenilo contienen 2-12 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alquenilo contienen 2-8 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alquenilo contienen 2-6 átomos de carbono. En algunas realizaciones, los grupos alquenilo contienen 2-5 átomos de carbono, en algunas realizaciones, los grupos alquenilo contienen 2-4 átomos de carbono, en algunas realizaciones, los grupos alquenilo contienen 2-3 átomos de carbono, y en algunas realizaciones, los grupos alquenilo contienen 2 átomos de carbono. Los grupos alquenilo incluyen, por ejemplo, etenilo, propenilo, butenilo y 1-metil-2-buten-1-ilo.

50 El término "alquinilo", tal como se emplea en esta memoria, se refiere a un grupo monovalente derivado de un resto alifático de cadena lineal o ramificada que tiene por lo menos un triple enlace carbono-carbono por eliminación de un átomo de hidrógeno sencillo. A menos que se especifique otra cosa, los grupos alquinilo contienen 2-12 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alquinilo contienen 2-8 átomos de carbono. En determinadas realizaciones, los grupos alquinilo contienen 2-6 átomos de carbono. En algunas realizaciones, los grupos alquinilo contienen 2-5 átomos de carbono, en algunas realizaciones, los grupos alquinilo contienen 2-4 átomos de carbono, en algunas realizaciones los grupos alquinilo contienen 2-3 átomos de carbono, y en algunas realizaciones, los grupos alquinilo contienen 2 átomos de carbono. Los grupos alquinilo representativos incluyen, aunque sin limitarse a ello, etinilo, 2-propinilo (propargilo) y 1-propinilo.

55 El término "alcoxi", tal como se emplea en la presente memoria, se refiere a un grupo alquilo, como se definió previamente, sujetado a la molécula principal a través de un átomo de oxígeno. Los ejemplos de alcoxi incluyen, entre otros, metoxi, etoxi, propoxi, isopropoxi, n-butoxi, terc-butoxi, neopentoxi y n-hexoxi.

El término "acilo", tal como se emplea en la presente memoria, se refiere a una funcionalidad que contiene carbonilo, p. ej., $-C(=O)R'$, en donde R' es hidrógeno o un grupo arilo, heteroarilo alifático, heteroalifático, heterocíclico opcionalmente sustituido, o es una funcionalidad que contiene oxígeno o nitrógeno sustituido (p. ej., con hidrógeno restos arilo o heteroarilo alifáticos, heteroalifáticos (p. ej., que forman una funcionalidad ácido carboxílico, éster o amida). El término "aciloxi", tal como se emplea en este documento, se refiere a un grupo acilo sujetado a la molécula principal a través de un átomo de oxígeno.

El término "arilo" utilizado solo o como parte de un resto más grande como en "aralquilo", "aralcoxi" o "ariloxialquilo", se refiere a sistemas de anillos monocíclicos o policíclicos que tienen un total de 5 a 20 miembros del anillo, en donde por lo menos un anillo en el sistema es aromático y en donde cada anillo en el sistema contiene 3 a 12 miembros del anillo. El término "arilo" se puede utilizar de manera intercambiable con la expresión "anillo arilo". En determinadas realizaciones de la presente invención, "arilo" hace referencia a un sistema de anillos aromáticos que incluyen, entre otros, fenilo, bifenilo, naftilo, antracilo y similares, que pueden portar uno o más sustituyentes. También se incluye dentro del alcance del término arilo", tal como se usa en este documento, un grupo en el cual un anillo aromático se condensa a uno o más anillos adicionales, como benzofuranilo, indanilo, ftalimidilo, naftimidilo, fenantriidinilo o tetrahidronaftilo y similares. En determinadas realizaciones, las expresiones "arilo de 6 a 10 miembros" y "arilo C_{6-10} " se refieren a un anillo fenilo o a un anillo arilo policíclico de 8 a 10 miembros.

Los términos "heteroarilo" y "heteroar-", utilizados solos o como parte de un resto más grande, p. ej., "heteroaralquilo" o "heteroaralcoxi", se refieren a grupos que tienen 5 a 14 átomos del anillo, preferiblemente 5, 6 o 9 átomos del anillo; que tienen 6, 10 o 14 electrones π compartidos en una ordenación cíclica; y que tienen, además de átomos de carbono, entre 1 y 5 heteroátomos. El término "heteroátomo" se refiere a un nitrógeno, oxígeno o azufre, e incluye cualquier forma oxidada de nitrógeno o azufre, y cualquier forma cuaternizada de un nitrógeno básico. Los grupos heteroarilo incluyen, sin limitación, tienilo, furanilo, pirrolilo, imidazolilo, pirazolilo, triazolilo, tetrazolilo, oxazolilo, isoxazolilo, oxadiazolilo, tiazolilo, isotiazolilo, tiadiazolilo, piridilo, piridazinilo, pirimidinilo, pirazinilo, indolizínilo, purínilo, naftiridinilo, benzofuranilo y pteridinilo. Los términos "heteroarilo" y "heteroar-", tal como se emplean en esta memoria, también incluyen grupos en los que un anillo heteroaromático se condensa a uno o más anillos arilo, cicloalifáticos o heterocíclico, en donde el radical o el punto de sujeción se encuentra en el anillo heteroaromático. Los ejemplos no limitativos incluyen indolilo, isoindolilo, benzotienilo, benzofuranilo, dibenzofuranilo, indazolilo, bencimidazolilo, benzotiazolilo, quinolilo, isoquinolilo, cinnolinilo, ftalazinilo, quinazolinilo, quinoxalinilo, 4*H*-quinolizínilo, carbazolilo, acridínilo, fenazinilo, fenotiazínilo, fenoxazinilo, tetrahidroquinolinilo, tetrahidroisoquinolinilo y pirido[2,3-*b*]-1,4-oxazin-3(4*H*)-ona. Un grupo heteroarilo puede ser mono o bicíclico. El término "heteroarilo" se puede utilizar en forma intercambiable con los términos "anillo heteroarilo", "grupo heteroarilo" o "heteroaromático", cualquiera de los cuales incluye anillos opcionalmente sustituidos. El término "heteroaralquilo" se refiere a un grupo sustituido con un heteroarilo, en donde las porciones alquilo y heteroarilo independientemente están opcionalmente sustituidas. En determinadas realizaciones, la expresión "heteroarilo de 5 a 10 miembros" se refiere a un anillo heteroarilo de 5 a 6 miembros que tiene 1 a 3 heteroátomos seleccionados entre nitrógeno, oxígeno o azufre, o un anillo heteroarilo bicíclico de 8 a 10 miembros que tiene 1 a 4 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre. En determinadas realizaciones, la expresión "heteroarilo de 5 a 12 miembros" se refiere a un anillo heteroarilo de 5 a 6 miembros que tiene 1 a 3 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre, o un anillo heteroarilo bicíclico de 8 a 12 miembros que tiene 1 a 4 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre.

Tal como se emplean en esta memoria, los términos "heterociclo", "heterocíclico", "radical heterocíclico" y "anillo heterocíclico" se utilizan de manera intercambiable y se refieren a un resto heterocíclico policíclico estable de 5 a 7 miembros o de 7-14 miembros que es o bien saturado o parcialmente insaturado, y que tienen, además de átomos de carbono, uno o más, preferiblemente uno a cuatro, heteroátomos, como se definió anteriormente. Cuando se usa en referencia a un átomo del anillo de un heterociclo, el término "nitrógeno" incluye un nitrógeno sustituido. Como ejemplo, en un anillo saturado o parcialmente insaturado que tiene 0-3 heteroátomos seleccionados entre oxígeno, azufre o nitrógeno, el nitrógeno puede ser N (como en 3,4-dihidro-2*H*-pirrolilo), NH (como en pirrolidinilo) o *NR (como en pirrolidinilo sustituido en *N*). En algunas realizaciones, el término "heterocíclico de 3 a 7 miembros" se refiere a un anillo heterocíclico monocíclico de 3 a 7 miembros saturado o parcialmente insaturado que tiene 1 a 2 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre. En algunas realizaciones, la expresión "heterocíclico de 3 a 12 miembros" se refiere a un anillo heterocíclico monocíclico saturado o parcialmente insaturado de 3 a 8 miembros que tiene 1 a 2 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre, o un anillo heterocíclico policíclico de 7 a 12 miembros saturado o parcialmente insaturado que tiene 1-3 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre.

Un anillo heterocíclico se puede sujetar a su grupo colgante en cualquier heteroátomo o átomo de carbono que resulta en una estructura estable y cualquiera de los átomos del anillo puede estar opcionalmente sustituido. Los ejemplos de dichos radicales heterocíclicos saturados o parcialmente insaturados incluyen, sin limitación, tetrahidrofuranilo, tetrahidrotienilo, pirrolidinilo, pirrolidonilo, piperidinilo, pirrolinilo, tetrahidroquinolinilo, tetrahidroisoquinolinilo, decahidroquinolinilo, oxazolidinilo, piperazinilo, dioxanilo, dioxolanilo, diazepinilo, oxazepinilo, tiazepinilo, morfolinilo y quinuclidinilo. Los términos "heterociclo", "heterocíclico", "anillo heterocíclico", "grupo heterocíclico", "resto heterocíclico" y "radical heterocíclico", se usan de manera intercambiable en este documento, y también incluyen grupos en los que un anillo heteroarilo se condensa a uno o más anillos arilo, heteroarilo o

cicloalifáticos, tal como indolinilo, 3*H*-indolilo, cromanilo, fenantridinilo o tetrahydroquinolinilo, en donde el radical o punto de sujeción está en el anillo heterocíclico. Un grupo heterocíclico puede ser mono o bicíclico. El término "heterocíclicolalquilo" se refiere a un grupo alquilo sustituido por un heterocíclico, en donde las porciones alquilo y heterocíclico están en forma independiente opcionalmente sustituidas.

- 5 Tal como se emplea en este documento, la expresión "parcialmente insaturado" se refiere a un resto del anillo que incluye por lo menos un doble o triple enlace. La expresión "parcialmente insaturado" tiene como fin abarcar anillos que tienen múltiples sitios de insaturación, pero no tiene como fin incluir restos arilo o heteroarilo, como se define en este documento.

10 Como se describe en este documento, los compuestos de la invención pueden contener restos "opcionalmente sustituidos". En general, el término "sustituido", o bien precedido por el término "opcionalmente" o no, significa que uno o más hidrógenos del resto designado se reemplazan con un sustituyente adecuado. A menos que se indique otra cosa, un grupo "opcionalmente sustituido" puede tener un sustituyente adecuado en cada posición sustituible del grupo, y si más de una posición en cualquier estructura determinada se puede sustituir con más de un sustituyente seleccionado de un grupo especificado, el sustituyente puede o bien ser el mismo o diferente en cada posición. Las combinaciones de sustituyentes contempladas por la presente invención preferiblemente resultan en la formación de compuestos estables o químicamente factibles. El término "estable", tal como se emplea en este documento, se refiere a compuestos que no se alteran sustancialmente cuando se someten a condiciones que permiten su producción, detección y, en ciertas realizaciones, su recuperación, purificación y uso para uno o más de los propósitos descritos en este documento.

20 Los sustituyentes monovalentes adecuados en un átomo de carbono sustituible de un grupo "opcionalmente sustituido" son en forma independiente halógeno; $-(CH_2)_{0-4}R^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}OR^\circ$; $-O-(CH_2)_{0-4}C(O)OR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}CH(OR^\circ)_2$; $-(CH_2)_{0-4}SR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}Ph$, que puede estar sustituido con R° ; $-(CH_2)_{0-4}O(CH_2)_{0-1}Ph$ que puede estar sustituido con R° ; $-CH=CHPh$, que puede estar sustituido con R° ; $-NO_2$; $-CN$; $-N_3$; $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)_2$; $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)R^\circ$; $-N(R^\circ)C(S)R^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)NR^\circ_2$; $-N(R^\circ)C(S)NR^\circ_2$; $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)OR^\circ$; $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)R^\circ$; $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)NR^\circ_2$; $+N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)OR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}C(O)R^\circ$; $-C(S)R^\circ$; $-(CN_2)_{0-4}C(O)OR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}C(O)N(R^\circ)_2$; $-(CN_2)_{0-4}C(O)SR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}C(O)OSiR^\circ_3$; $-(CH_2)_{0-4}OC(O)R^\circ$; $-OC(O)(CH_2)_{0-4}SR^\circ$; $SC(S)SR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}SC(O)R^\circ$; $-(CN_2)_{0-4}C(O)NR^\circ_2$; $-C(S)NR^\circ_2$; $-C(S)SR^\circ$; $-SC(S)SR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}OC(O)NR^\circ_2$; $-C(O)N(OR^\circ)R^\circ$; $-C(O)C(O)R^\circ$; $-C(O)CH_2C(O)R^\circ$; $-C(NOR^\circ)R^\circ$; $-(CN_2)_{0-4}SSR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}S(O)_2R^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}S(O)_2OR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}OS(O)_2R^\circ$; $-S(O)_2NR^\circ_2$; $-(CH_2)_{0-4}S(O)R^\circ$; $-N(R^\circ)S(O)_2NR^\circ_2$; $-N(R^\circ)S(O)_2R^\circ$; $-N(OR^\circ)R^\circ$; $-C(NH)NR^\circ_2$; $-P(O)_2R^\circ$; $-P(O)R^\circ_2$; $-OP(O)R^\circ_2$; $-OP(O)(OR^\circ)_2$; SiR°_3 ; $-(alquilenos C_{1-4} lineal o ramificado)O-N(R^\circ)_2$; o $- (alquilenos C_{1-4} lineal o ramificado)C(O)O-N(R^\circ)_2$, en donde cada R° puede sustituirse como se define a continuación y es en forma independiente hidrógeno, alifático C_{1-8} , $-CH_2Ph$, $-O(CH_2)_{0-1}Ph$, o un anillo arilo saturado, parcialmente saturado de 5-6 miembros que tiene 0-4 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre, o, sin perjuicio de la definición anterior, dos casos independientes de R° , tomados junto con su átomo(s) interviniente, forman un anillo mono o policíclico arilo de 3-12 miembros, saturado o parcialmente insaturado que tiene 0-4 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre, que puede sustituirse como se define a continuación.

Los sustituyentes monovalentes adecuados en R° (o el anillo formado por dos casos independientes de R° junto con sus átomos intervinientes), son en forma independiente halógeno, $-(CH_2)_{0-2}R^\circ$, $-(haloR^\circ)$, $-(CH_2)_{0-2}OH$, $-(CH_2)_{0-2}OR^\circ$, $-(CH_2)_{0-2}CH(OR^\circ)_2$; $-O(haloR^\circ)$, $-CN$, $-N_3$, $-(CH_2)_{0-2}C(O)R^\circ$, $-(CH_2)_{0-2}C(O)OH$, $-(CH_2)_{0-2}C(O)OR^\circ$, $-(CH_2)_{0-4}C(O)N(R^\circ)_2$; $-(CH_2)_{0-2}SR^\circ$, $-(CH_2)_{0-2}SH$, $-(CH_2)_{0-2}NH_2$, $-(CH_2)_{0-2}NHR^\circ$, $-(CH_2)_{0-2}NR^\circ_2$; $-NO_2$, $-SiR^\circ_3$, $-OSiR^\circ_3$, $-C(O)SR^\circ$, $-(alquilenos C_{1-4} de cadena lineal o ramificada)C(O)OR^\circ$ o $-SSR^\circ$ en donde cada R° está insustituido o si está precedido por "halo" se sustituye solamente con uno o más halógenos, y se selecciona en forma independiente entre alifático C_{1-4} , $-CH_2Ph$, $-O(CH_2)_{0-1}Ph$, o un anillo arilo de 5-6 miembros saturado o parcialmente insaturado que tiene 0-4 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre. Los sustituyentes divalentes adecuados en un átomo de carbono saturado de R° incluyen $=O$ y $=S$.

Los sustituyentes divalentes adecuados en un átomo de carbono saturado de un grupo "opcionalmente sustituido" incluyen los siguientes: $=O$, $=S$, $=NNR^\circ_2$, $=NNHC(O)R^\circ$, $=NNHC(O)OR^\circ$, $=NNHS(O)_2R^\circ$, $=NR^\circ$, $=NOR^\circ$, $-O(C(R^\circ)_2)_{2-3}O-$ o $-S(C(R^\circ)_2)_{2-3}S-$, en donde cada caso independiente de R° se selecciona de hidrógeno, alifático C_{1-6} que puede sustituirse como se define a continuación, o un anillo arilo insustituido de 5-6 miembros, saturado o parcialmente insaturado que tiene 0-4 heteroátomos independientemente seleccionados entre nitrógeno, oxígeno o azufre. Los sustituyentes divalentes adecuados que están ligados a carbonos sustituibles vecinos de un grupo "opcionalmente sustituido" incluyen: $-O(CR^\circ_2)_{2-3}O-$, en donde cada caso independiente de R° se selecciona entre hidrógeno, alifático C_{1-6} que puede sustituirse como se define a continuación, o un anillo arilo insustituido de 5-6 miembros, saturado o parcialmente insaturado que tiene 0-4 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre.

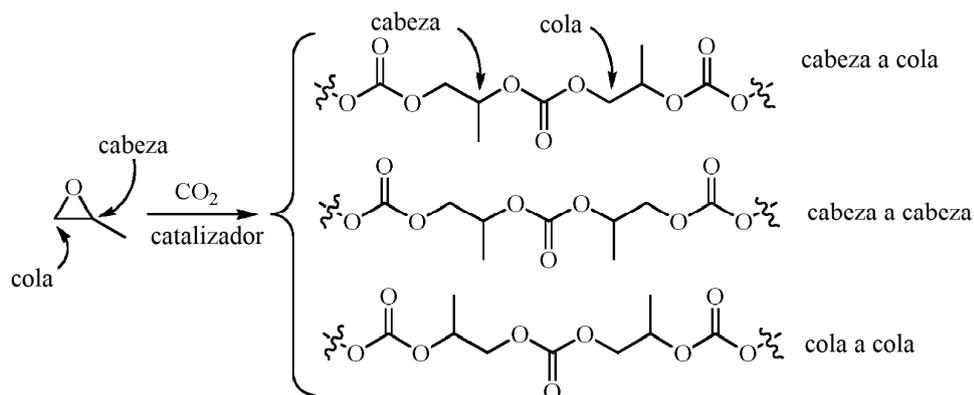
Los sustituyentes adecuados en el grupo alifático de R° incluyen halógeno, $-R^\circ$, $-(haloR^\circ)$, $-OH$, $-OR^\circ$, $-O(haloR^\circ)$, $-CN$, $-C(O)OH$, $-C(O)OR^\circ$, $-NH_2$, $-NHR^\circ$, $-NR^\circ_2$ o $-NO_2$, en donde cada R° está insustituido o si está precedido por "halo" está sustituido solamente con uno o más halógenos, y es en forma independiente alifático C_{1-4} , $-CH_2Ph$, $-O(CH_2)_{0-1}Ph$, o un anillo arilo de 5-6 miembros saturado o parcialmente insaturado que tiene 0-4 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre.

Los sustituyentes adecuados en un nitrógeno sustituible de un grupo "opcionalmente sustituido" incluyen $-R^\dagger$, $-NR^\dagger_2$, $-C(O)R^\dagger$, $-C(O)OR^\dagger$, $-C(O)C(O)R^\dagger$, $-C(O)CH_2C(O)R^\dagger$, $-S(O)_2R^\dagger$, $-S(O)_2NR^\dagger_2$, $-C(S)NR^\dagger_2$, $-C(NH)NR^\dagger_2$ o $-N(R^\dagger)S(O)_2R^\dagger$; en donde cada R^\dagger es en forma independiente hidrógeno, alifático C_{1-6} que puede estar sustituido como se define a continuación, $-OPh$ insustituido o un anillo arilo insustituido de 5-6 miembros, saturado o parcialmente insaturado que tiene 0-4 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre, o sin perjuicio de la definición anterior, dos casos independientes de R^\dagger , tomados junto con su átomo(s) interviniente forman un anillo arilo mono o bicíclico insustituido de 3-12 miembros saturado o parcialmente insaturado que tiene 0-4 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre.

Los sustituyentes adecuados en el grupo alifático de R^\dagger son en forma independiente halógeno, $-R'$, $-(haloR')$, $-OH$, $-OR'$, $-O(haloR')$, $-CN$, $-C(O)OH$, $-C(O)OR'$, $-NH_2$, $-NHR'$, $-NR'_2$ o $-NO_2$, en donde cada R' se sustituye o si está precedido por "halo" está sustituido solamente con uno o más halógenos, y es en forma independiente alifático C_{1-4} , $-CH_2Ph$, $-O(CH_2)_{0-1}Ph$ o un anillo arilo de 5-6 miembros saturado o parcialmente insaturado que tiene 0-4 heteroátomos seleccionados en forma independiente entre nitrógeno, oxígeno o azufre.

Si los sustituyentes se describen en este documento, algunas veces se utiliza el término "radical" o la expresión "radical opcionalmente sustituido". En este contexto, "radical" significa un resto o grupo funcional que tiene una posición disponible para sujeción a la estructura en la cual se une el sustituyente. En general, el punto de sujeción portaría un átomo de hidrógeno si el sustituyente fuese una molécula neutral independiente en lugar de un sustituyente. El término "radical" o la expresión "radical opcionalmente sustituido" en este contexto es por lo tanto intercambiable con "grupo" o "grupo opcionalmente sustituido".

Tal como se emplea en esta memoria, la expresión "cabeza a cola" o "HT", se refiere a la regioquímica de unidades de repetición adyacentes en una cadena polimérica. Por ejemplo, en el contexto de poli(propileno carbonato) (PPC), la expresión cabeza a cola se basa en las tres posibilidades regioquímicas ilustradas a continuación:



La expresión "relación cabeza a cola" o (H:T) se refiere a la proporción de enlaces cabeza a cola a la suma de todas las otras posibilidades regioquímicas. Con respecto a la ilustración de estructuras poliméricas, si bien se puede mostrar una orientación regioquímica específica de unidades monoméricas en las representaciones de estructuras poliméricas de este documento, no se tiene como fin limitar las estructuras poliméricas a la disposición regioquímica que se exhibe, sino que se debe interpretar que abarca todas las disposiciones regioquímicas incluida aquella ilustrada, la regioquímica opuesta, mezclas aleatorias, materiales isotácticos, materiales sindiotácticos, materiales racémicos y/o materiales enantioenriquecidos y combinaciones de cualquiera de estos, a menos que se especifique otra cosa.

Tal como se emplea en esta memoria, el término "alcoxilado" significa que uno o más grupos funcionales en una molécula (usualmente el grupo funcional es un alcohol, amina o ácido carboxílico, pero no se limita estrictamente a estos) se han anexo a una cadena de alquilo terminada en hidroxilo. Los compuestos alcoxilados pueden comprender un grupo alquilo sencillo o pueden ser restos oligoméricos tales como poliéteres terminados en hidroxilo. Los materiales alcoxilados pueden derivar de compuestos principales por tratamiento de los grupos funcionales con epóxidos.

Breve descripción de los dibujos

La **Figura 1** muestra una fotografía de muestras de espuma flexibles preparadas de acuerdo con los Ejemplos 1A a 1D junto con una muestra de espuma flexible control (comparativa).

La **Figura 2** muestra una fotografía de muestras de espuma microcelular preparadas de acuerdo con los Ejemplos 2L y 2M junto con una muestra de espuma microcelular control (de acuerdo con la invención).

La **Figura 3** muestra una fotografía de muestras de espuma rígidas preparadas de acuerdo con los métodos de los Ejemplos 3A y 3B junto con una muestra de espuma rígida control (comparativa).

Descripción detallada de determinadas realizaciones

En un aspecto, la presente descripción abarca composiciones poliméricas que comprenden cadenas de policarbonato alifáticas reticuladas o cadena extendida a través de enlaces uretano. En determinadas realizaciones, estas composiciones poliméricas comprenden espumas de poliuretano, termoplásticos o elastómeros.

- 5 El campo de fabricación y formulación de poliuretano se encuentra muy avanzado. En algunas realizaciones, los materiales nuevos presentados en este documento se formulan, procesan y usan de acuerdo con métodos conocidos en la técnica. Combinando el conocimiento de la técnica con la descripción de este documento, el experto en el campo captará variaciones, modificaciones y aplicaciones de las composiciones, y dichas variaciones se abarcan específicamente en este documento. Las siguientes referencias contienen información sobre la formulación, fabricación y usos de las espumas y elastómeros de poliuretano.

Vahid Sendjarevic, et al.; Polymeric Foams And Foam Technology, 2ª edición, Hanser Gardner Publications; 2004 (ISBN 978-1569903360)

David Eaves; Handbook of Polymer Foams, Smithers Rapra Press; 2004 (ISBN 978-1859573884)

Shau-Tarng Lee et al.; Polymeric Foams: Science and Technology, CRC Press 2006 (ISBN 978-0849330759)

- 15 Kaneyoshi Ashida; Polyurethane and Related Foams: Chemistry and Technology, CRC Press; 2006 (ISBN 978-1587161599)

Handbook of Thermoplastic Elastomers, William Andrew Publishers, 2007 (ISBN 978-0815515494)

The Polyurethanes Book, J. Wiley & Sons, 2003 (ISBN 978-0470850411)

- 20 En un aspecto, las composiciones de poliuretano de la presente invención se derivan combinando dos composiciones: una primera composición que comprende uno o más compuestos isocianato que opcionalmente contiene diluyentes, disolventes, co-reaccionantes y similares (típicamente ilustrada como la mezcla secundaria A), y una segunda composición que comprende uno o más polioles opcionalmente con reaccionantes, disolventes, catalizadores o aditivos adicionales (típicamente ilustrada como la mezcla secundaria B). Antes de describir íntegramente estas composiciones, se describirán íntegramente los polioles e isocianatos a partir de los cuales se formulan.

I. Polioles de policarbonato alifático

- 30 Esta sección describe algunos de los polioles de policarbonato alifático que han sido útiles para elaborar las composiciones de la presente invención. En determinadas realizaciones, las composiciones de la presente invención comprenden polioles de policarbonato alifático derivados de la copolimerización de uno o más epóxidos y dióxido de carbono. Los ejemplos de polioles adecuados, además de métodos para prepararlos, se describen en la publicación PCT WO2010/028362.

- 35 Es ventajoso para muchas de las realizaciones descritas en este documento que los polioles de policarbonato alifático utilizados tengan un alto porcentaje de grupos reactivos. Dichos grupos terminales reactivos son típicamente grupos hidroxilo, pero pueden estar presentes otros grupos funcionales reactivos si los polioles se tratan para modificar la química de los grupos terminales. Dichos materiales modificados pueden terminar en grupos amino, grupos tiol, grupos alqueno, grupos carboxilato, grupos isocianato y similares. Para los propósitos de la presente invención, la expresión 'poliol de policarbonato alifático' típicamente se refiere a materiales terminados en -OH, pero también incluye estas composiciones modificadas de grupos terminales, a menos que se especifique algo distinto.

- 40 En determinadas realizaciones, por lo menos 90% de los grupos terminales del poliol de policarbonato utilizado son grupos -OH. En determinadas realizaciones, por lo menos 95%, por lo menos 96%, por lo menos 97% o por lo menos 98% de los grupos terminales del poliol de policarbonato utilizado son grupos -OH. En determinadas realizaciones, más de 99%, más de 99,5%, más de 99,7% o más de 99,8% de los grupos terminales del poliol de policarbonato utilizado son grupos -OH. En determinadas realizaciones, más de 99,9% de los grupos terminales del poliol de policarbonato son grupos -OH.

- 45 Otra forma de expresar el contenido del grupo terminal -OH de una composición de poliol es informando su OH# que se mide usando métodos conocidos en la técnica. En determinadas realizaciones, los polioles de policarbonato alifático utilizados en la presente invención tienen un # mayor que aproximadamente 40. En determinadas realizaciones, los polioles de policarbonato alifático tienen un OH# mayor que aproximadamente 50, mayor que aproximadamente 75, mayor que aproximadamente 100 o mayor que aproximadamente 120.

- 50 En determinadas realizaciones, es ventajoso que las composiciones de poliol de policarbonato alifático tengan una proporción sustancial de grupos terminales hidroxilo primarios. Esta es la norma para composiciones que comprenden poli(etilencarbonato), pero para copolimerización de polioles derivados de epóxidos sustituidos con CO₂ es común que algunos o todos los extremos de la cadena consistan en grupos hidroxilo secundarios. En determinadas realizaciones, dichos polioles se tratan para aumentar la proporción de grupos terminales -OH

primarios. Esto se puede lograr sometiendo a reacción los grupos hidroxilo secundarios con reactivos tales como óxido de etileno, lactonas reactivas y similares. En determinadas realizaciones, los polioles de policarbonato alifático se tratan con beta lactonas, caprolactona y similares para introducir grupos terminales hidroxilo primarios.

5 En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden un copolímero de dióxido de carbono y uno o más epóxidos. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden un copolímero de dióxido de carbono y óxido de etileno. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden un copolímero de dióxido de carbono y óxido de propileno. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden un copolímero de dióxido de carbono y óxido de ciclohexeno. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden un copolímero de dióxido de carbono y óxido de ciclopenteno. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden un copolímero de dióxido de carbono y óxido de 3-vinil ciclohexano.

15 En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden un terpolímero de dióxido de carbono y óxido de etileno junto con uno o más epóxidos adicionales seleccionados del grupo que consiste en óxido de propileno, óxido de 1,2-buteno, óxido de 2,3-buteno, óxido de ciclohexeno, óxido de 3-vinil ciclohexeno, epiclorohidrina, glicidil ésteres, glicidil éteres, óxidos de estireno y epóxidos de alfaolefinas superiores. En determinadas realizaciones, dichos terpolímeros contienen una mayoría de unidades de repetición derivadas de óxido de etileno con cantidades inferiores de unidades de repetición derivadas de uno o más epóxidos adicionales. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen aproximadamente 50% hasta aproximadamente 99,5% unidades de repetición derivadas de óxido de etileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de aproximadamente 60% unidades de repetición derivadas de óxido de etileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 75% unidades de repetición derivadas de óxido de etileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 80% unidades de repetición derivadas de óxido de etileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 85% unidades de repetición derivadas de óxido de etileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 90% unidades de repetición derivadas de óxido de etileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 95% unidades de repetición derivadas de óxido de etileno.

30 En algunas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden un copolímero de dióxido de carbono y óxido de propileno junto con uno o más epóxidos adicionales seleccionados del grupo que consiste en óxido de etileno, óxido de 1,2-buteno, óxido de 2,3-buteno, óxido de ciclohexeno, óxido de 3-vinil ciclohexeno, epiclorohidrina, glicidil ésteres, glicidil éteres, óxidos de estireno y epóxidos de alfaolefinas superiores. En determinadas realizaciones, dichos terpolímeros contienen una mayoría de unidades de repetición derivadas de óxido de propileno con cantidades inferiores de unidades de repetición derivadas de uno o más epóxidos adicionales. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen aproximadamente 50% a aproximadamente 99,5% unidades de repetición derivadas de óxido de propileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 60% unidades de repetición derivadas de óxido de propileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 75% unidades de repetición derivadas de óxido de propileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 80% unidades de repetición derivadas de óxido de propileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 85% unidades de repetición derivadas de óxido de propileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 90% unidades de repetición derivadas de óxido de propileno. En determinadas realizaciones, los terpolímeros contienen más de 95% unidades de repetición derivadas de óxido de propileno.

45 En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático de la presente invención comprenden polímeros sustancialmente alternantes que contienen un alto porcentaje de enlaces carbonato y un bajo contenido de enlaces éter. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático de la presente invención se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 85% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 90% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 91% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 92% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 93% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 94% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 95% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 96% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 97% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 98% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 99% o más. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces

carbonato es 99,5% o más. En determinadas realizaciones, los porcentajes anteriores excluyen enlaces éter presentes en los iniciadores de polimerización o en agentes de transferencia de cadenas y se refieren solamente a los enlaces formados durante la copolimerización de CO₂-epóxido.

5 En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático de la presente invención se caracterizan porque esencialmente no contienen enlaces éter dentro de las cadenas poliméricas derivadas de la copolimerización de CO₂-epóxido o dentro de cualquiera de los iniciadores de polimerización, agentes de transferencia de cadenas o grupos terminales que pueden estar presentes en el polímero. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque contienen, en promedio, menos de un enlace éter por cadena polimérica dentro de la composición. En determinadas realizaciones, las composiciones de policarbonato alifático se caracterizan porque esencialmente no contienen enlaces éter.

10 En determinadas realizaciones si un policarbonato alifático deriva de epóxidos mono-sustituídos (p. ej., como óxido de propileno, óxido de 1,2-butileno, epiclorhidrina, alfaolefinas epoxidizadas o un derivado de glicidol), el policarbonato alifático se caracteriza porque es regiorregular. La regiorregularidad se puede expresar como el porcentaje de unidades de monómero adyacentes que se orientan en una disposición de cabeza a cola dentro de la cadena polimérica. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático en las composiciones de polímero inventivas tienen un contenido de cabeza a cola superior a aproximadamente 80%. En determinadas realizaciones, el contenido de cabeza a cola es superior a aproximadamente 85%. En determinadas realizaciones, el contenido de cabeza a cola es superior a aproximadamente 90%. En determinadas realizaciones, el contenido de cabeza a cola es superior a aproximadamente 91%, superior a aproximadamente 92%, superior a aproximadamente 93%, superior a aproximadamente 94% o superior a aproximadamente 95%. En determinadas realizaciones, el contenido de cabeza a cola del polímero es según lo determinado por espectroscopia de RMN de protones o carbono-13.

15 En determinadas realizaciones, los polioles de policarbonato alifático útiles para la presente invención tienen una viscosidad controlada para estar dentro de un intervalo particular. El intervalo preferido puede depender de una aplicación particular y se puede controlar para estar dentro del intervalo normal para una aplicación particular.

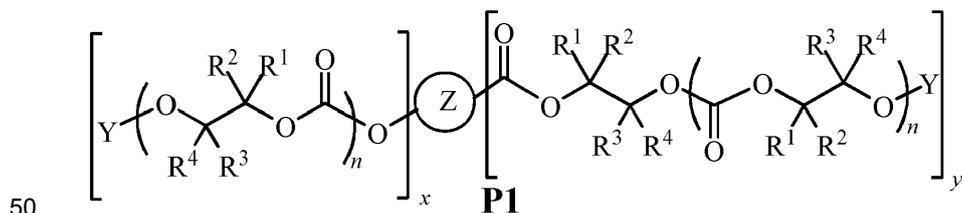
20 En determinadas realizaciones, si el poliol de policarbonato alifático se usa en la formulación de una espuma rígida o de una composición termoplástica, el poliol tiene una viscosidad, según lo medido a una temperatura de por lo menos 20 °C pero menos de 70 °C, de menos de aproximadamente 30.000 cps. En determinadas realizaciones, dichos polioles tienen una viscosidad de menos de aproximadamente 20.000 cps, menos de aproximadamente 15.000 cps, menos de aproximadamente 12.000 cps o menos de aproximadamente 10.000 cps. En determinadas realizaciones, dichos polioles tienen una viscosidad entre aproximadamente 600 y aproximadamente 30.000 cps. En determinadas realizaciones, dichos polioles tienen una viscosidad entre aproximadamente 2.000 y aproximadamente 20.000 cps. En determinadas realizaciones, dichos polioles tienen una viscosidad entre aproximadamente 5.000 y aproximadamente 15.000 cps (1 cps = 1 mPa·s).

25 En otras realizaciones, si el poliol de policarbonato alifático se usa en la formulación de una espuma flexible, el poliol tiene una viscosidad, según lo medido a una temperatura de por lo menos 20 °C pero menos de 70 °C, de menos de aproximadamente 10.000 cps. En determinadas realizaciones, dichos polioles tienen una viscosidad de menos de aproximadamente 8.000 cps, menos de aproximadamente 6.000 cps, menos de aproximadamente 3.000 cps o menos de aproximadamente 2.000 cps. En determinadas realizaciones, dichos polioles tienen una viscosidad entre aproximadamente 1.000 y aproximadamente 10.000 cps. En determinadas realizaciones, dichos polioles tienen una viscosidad entre aproximadamente 1.000 y aproximadamente 6.000 cps (1 cps = 1 mPa·s).

30 En determinadas realizaciones, los valores de viscosidad del poliol descritos anteriormente representan la viscosidad según lo medido a 25 °C. En determinadas realizaciones, los valores de viscosidad anteriormente descritos representan la viscosidad según lo medido a 30 °C, 40 °C, 50 °C, 60 °C o 70 °C.

35 En determinadas realizaciones, los polioles de policarbonato alifático útiles para la presente invención tienen una Tg dentro de un intervalo particular. La Tg deseada suele variar con la aplicación y se puede controlar que esté dentro del intervalo normal conocido para una aplicación particular.

40 En determinadas realizaciones, las composiciones de la presente invención comprenden polioles de policarbonato alifático que tienen una estructura **P1**:



50 en donde,

5 R¹, R², R³ y R⁴ se seleccionan, en cada caso en la cadena polimérica, en forma independiente, del grupo que consiste en -H, flúor, un grupo alifático C₁₋₃₀ opcionalmente sustituido y un grupo heteroalifático C₁₋₂₀ opcionalmente sustituido, y un grupo arilo C₆₋₁₀ opcionalmente sustituido, en donde cualquiera de dos o más de R¹, R², R³ y R⁴ puede opcionalmente tomarse junto con los átomos intervinientes para formar uno o más anillos opcionalmente sustituidos, que opcionalmente contienen uno o más heteroátomos;

Y es, en cada caso, en forma independiente, -H o el sitio de sujeción a cualquiera de los restos de extensión de cadenas descritos en las clases y subclases de este documento;

n es en cada caso, en forma independiente, un número entero entre aproximadamente 3 y aproximadamente 1.000;



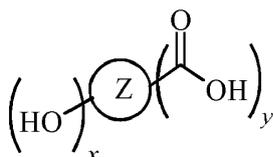
es un resto multivalente; y

10 x e y son cada uno en forma independiente un número entero entre 0 y 6, en donde la suma de x e y oscila entre 2 y 6.



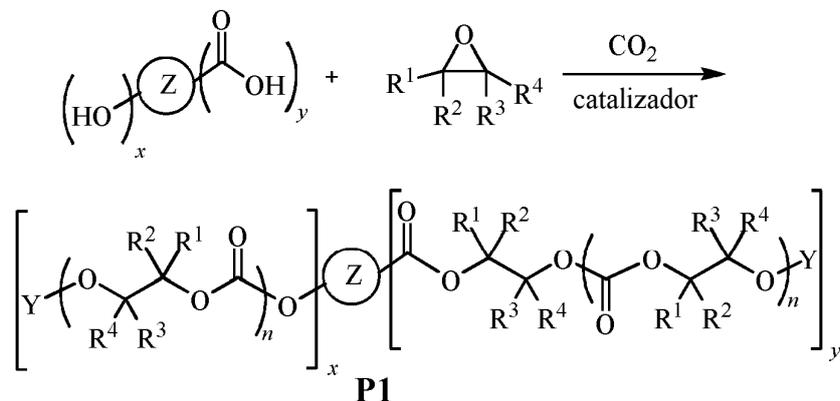
15 En determinadas realizaciones, el resto multivalente insertado dentro de la cadena de policarbonato alifático deriva de un agente de transferencia de cadena polifuncional que tiene dos o más sitios desde los cuales puede ocurrir la copolimerización de epóxido/CO₂. En determinadas realizaciones, dichas copolimerizaciones se realizan en presencia de agentes de transferencia de cadenas polifuncionales como se ejemplifica en la solicitud publicada PCT/US2009/056220 (WO/2010/028362).

En determinadas realizaciones, un agente de transferencia de cadena polifuncional posee la fórmula:



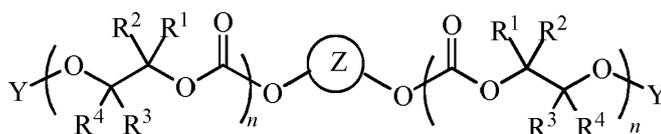
20 en donde en cada uno de , x, e y es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático en las composiciones poliméricas derivan de la copolimerización de uno o más epóxidos con dióxido de carbono en presencia de dichos agentes de transferencia de cadenas polifuncionales como se muestra en el Esquema 2:



Esquema 2

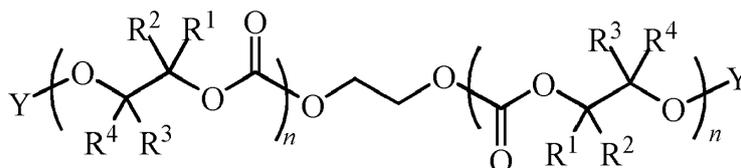
25 En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático en las composiciones poliméricas de la presente invención comprenden cadenas con una estructura P2:

**P2**

en donde cada uno de R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y , Z y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones en donde las cadenas de policarbonato alifático tienen una estructura **P2**, Z

- 5 deriva de un alcohol dihídrico. En dichos casos Z representa el esqueleto que contiene carbono del alcohol dihídrico, mientras que los dos átomos de oxígeno adyacentes a Z derivan de grupos $-OH$ del diol. Por ejemplo, si el agente de transferencia de cadena polifuncional fuese etilenglicol, entonces Z sería $-CH_2CH_2-$ y **P2** tendría la siguiente estructura:



- 10 En determinadas realizaciones, en donde Z deriva de un alcohol dihídrico, el alcohol dihídrico comprende un diol C_{2-40} . En determinadas realizaciones, el alcohol dihídrico se selecciona del grupo que consiste en: 1,2-etanodiol, 1,2-propanodiol, 1,3-propanodiol, 1,2-butanodiol, 1,3-butanodiol, 1,4-butanodiol, 1,5-pentanodiol, 2,2-dimetilpropano-1,3-diol, 2-butil-2-etilpropano-1,3-diol, 2-metil-2,4-pentano diol, 2-etil-1,3-hexano diol, 2-metil-1,3-propano diol, 1,5-hexanodiol, 1,6-hexanodiol, 1,8-octanodiol, 1,10-decanodiol, 1,12-dodecanodiol, 2,2,4,4-tetrametilciclobutano-1,3-diol, 1,3-ciclopentanodiol, 1,2-ciclohexanodiol, 1,3-ciclohexanodiol, 1,4-ciclohexanodiol, 1,2-ciclohexanodimetanol, 1,3-ciclohexanodimetanol, 1,4-ciclohexanodimetanol, 1,4-ciclohexanodietanol, isosorbida, glicerol monoésteres, glicerol monoéteres, trimetilolpropano monoésteres, trimetilolpropano monoéteres, pentaeritritol diésteres, pentaeritritol diéteres y derivados alcoxilados de cualquiera de estos.

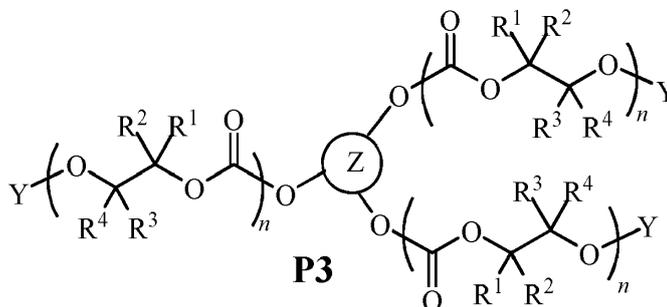
- 20 En determinadas realizaciones, en donde Z deriva de un alcohol dihídrico, el alcohol dihídrico se selecciona del grupo que consiste en: dietilenglicol, trietilenglicol, tetraetilenglicol y poli(etilenglicol) superior.

En determinadas realizaciones, en donde Z deriva de un alcohol dihídrico, el alcohol dihídrico comprende un derivado alcoxilado de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en: un diácido o un hidroxiácido. En determinadas realizaciones, los derivados alcoxilados comprenden compuestos etoxilados o propoxilados.

- 25 En determinadas realizaciones, en donde Z deriva de un alcohol dihídrico, el alcohol dihídrico comprende un diol polimérico. En determinadas realizaciones, un diol polimérico se selecciona del grupo que consiste en poliéteres, poliésteres, poliolefinas terminadas en hidroxilo, copoliésteres de poliéter, policarbonatos de poliéter, copoliésteres de policarbonato, polímeros de polioximetileno y análogos alcoxilados de cualquiera de estos. En determinadas realizaciones, el diol polimérico posee un peso molecular promedio de menos de aproximadamente 2000 g/mol.

- 30 En determinadas realizaciones, Z deriva de un alcohol polihídrico con más de dos grupos hidroxilo. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático en las composiciones poliméricas de la presente

invencción comprenden cadenas de policarbonato alifático en donde el resto \textcircled{Z} deriva de un triol. En determinadas realizaciones, dichas cadenas de policarbonato alifático tienen la estructura **P3**:



5 en donde cada uno de R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y , \textcircled{Z} y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

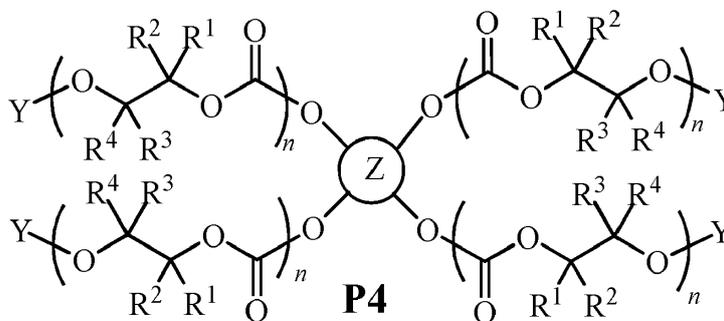
10 En determinadas realizaciones en donde \textcircled{Z} deriva de un triol, el triol se selecciona del grupo que consiste en: glicerol, 1,2,4-butanotriol, 2-(hidroximetil)-1,3-propanodiol; hexano trioles, trimetilol propano, trimetilol etano, trimetilolhexano, 1,4-ciclohexanotrimetanol, pentaeritritol monoésteres, pentaeritritol monoésteres y análogos alcoxilados de cualquiera de estos. En determinadas realizaciones, los derivados alcoxilados comprenden compuestos etoxilados o propoxilados.

En determinadas realizaciones, \textcircled{Z} deriva de un derivado alcoxilado de un ácido carboxílico trifuncional o hidroxiaácido trifuncional. En determinadas realizaciones, los derivados alcoxilados comprenden compuestos etoxilados o propoxilados.

15 En determinadas realizaciones, en donde \textcircled{Z} deriva de un triol polimérico, el triol polimérico se selecciona del grupo que consiste en poliéteres, poliésteres, poliolefinas terminadas en hidroxil, poliéter-copolíesteres, poliéter policarbonatos, polímeros de polioximetileno, policarbonato-copolíesteres y análogos alcoxilados de cualquiera de estos. En determinadas realizaciones, los trioles poliméricos alcoxilados comprenden compuestos etoxilados o propoxilados.

20 En determinadas realizaciones, \textcircled{Z} deriva de un alcohol polihídrico con cuatro grupos hidroxil. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático en las composiciones poliméricas de la presente invencción

comprenden cadenas de policarbonato alifático en las que el resto \textcircled{Z} deriva de un tetraol. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático en las composiciones poliméricas de la presente invencción comprenden cadenas con la estructura **P4**:

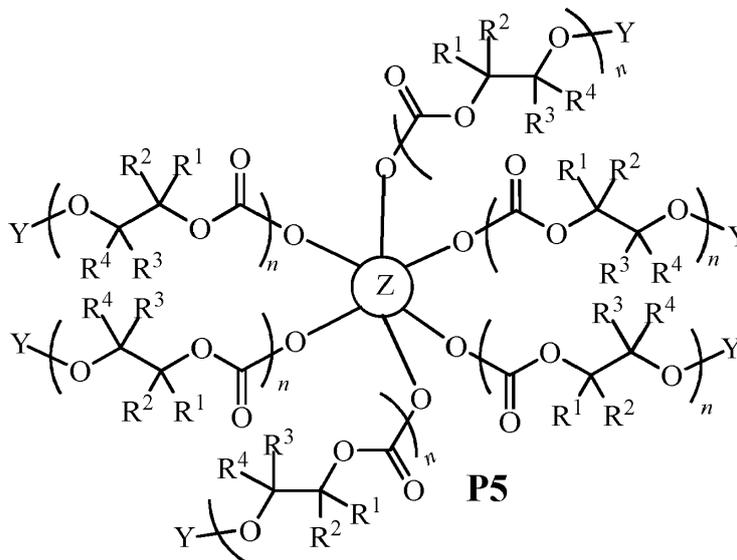


25 en donde cada uno de R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y , \textcircled{Z} y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, \textcircled{Z} deriva de un alcohol polihídrico con más de cuatro grupos hidroxilo. En

determinadas realizaciones, \textcircled{Z} deriva de un alcohol polihídrico con seis grupos hidroxilo. En determinadas realizaciones, un alcohol polihídrico es dipentaeritritol o su análogo alcoxilado. En determinadas realizaciones, un alcohol polihídrico es sorbitol o su análogo alcoxilado. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático en las composiciones poliméricas de la presente invención comprenden cadenas con la estructura **P5**:

5



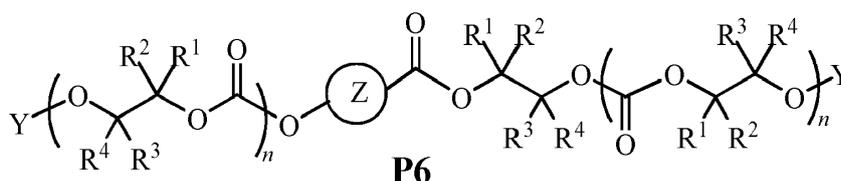
en donde cada uno de R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y , \textcircled{Z} y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

10

En determinadas realizaciones, los policarbonatos alifáticos de la presente invención comprenden una combinación de cadenas bifuncionales (p. ej., policarbonatos de fórmula **P2**) en combinación con cadenas funcionales superiores (p. ej., uno o más policarbonatos de fórmulas **P3** a **P5**).

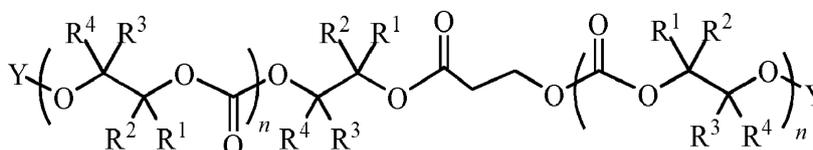
En determinadas realizaciones, \textcircled{Z} deriva de un hidroxiaácido. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático en las composiciones de polímero de la presente invención comprenden cadenas con la estructura **P6**:

15



en donde cada uno de R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y , \textcircled{Z} y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento. En dichos casos, \textcircled{Z} representa el esqueleto que contiene carbono del hidroxiaácido, mientras que los enlaces éster y carbonato adyacentes a \textcircled{Z} derivan del grupo $-\text{CO}_2\text{H}$ y el grupo hidroxilo del hidroxiaácido. Por ejemplo, si \textcircled{Z} derivara de ácido 3-hidroxipropanoico, entonces \textcircled{Z} sería $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ y **P6** tendría la siguiente estructura:

20



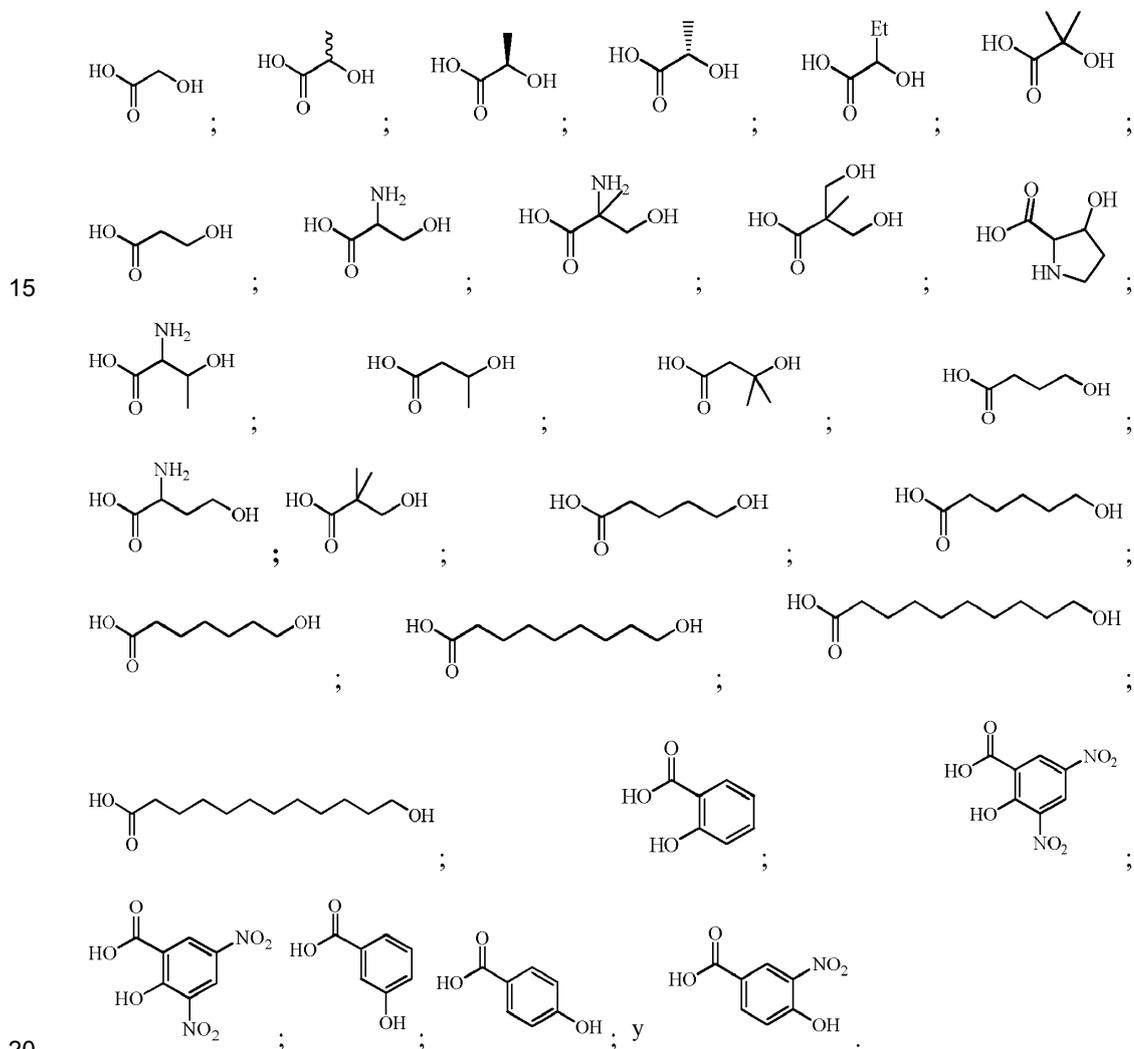
En determinadas realizaciones, Z deriva de un hidroxiaácido C_{2-40} opcionalmente sustituido. En determinadas realizaciones, Z deriva de un poliéster.

5 En determinadas realizaciones, un hidroxiaácido es un alfa-hidroxiaácido. En determinadas realizaciones, un hidroxiaácido se selecciona del grupo que consiste en: ácido glicólico, ácido DL-láctico, ácido D-láctico, ácido L-láctico, ácido cítrico y ácido mandélico.

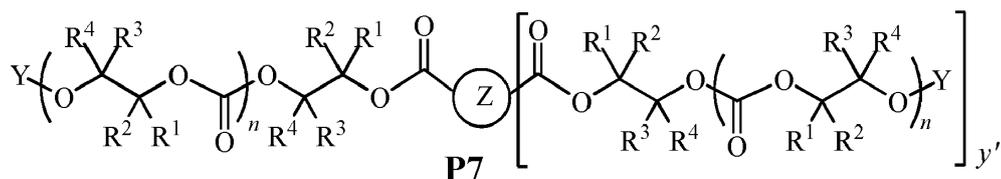
En determinadas realizaciones, un hidroxiaácido es un beta-hidroxiaácido. En determinadas realizaciones, un hidroxiaácido se selecciona del grupo que consiste en: ácido 3-hidroxipropiónico, ácido DL 3-hidroxibutírico, ácido D-3 hidroxibutírico, ácido L-3-hidroxibutírico, ácido DL-3-hidroxi valérico, ácido D-3-hidroxi valérico, ácido L-3-hidroxi valérico, ácido salicílico y derivados de ácido salicílico.

10 En determinadas realizaciones, un hidroxiaácido es un hidroxiaácido $\alpha\text{-}\omega$. En determinadas realizaciones, un hidroxiaácido se selecciona del grupo que consiste en: hidroxiaácidos $\alpha\text{-}\omega$ alifáticos C_{3-20} opcionalmente sustituidos y ésteres oligoméricos.

En determinadas realizaciones, un hidroxiaácido se selecciona del grupo que consiste en:

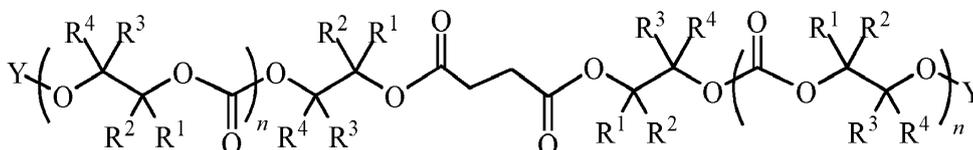


En determinadas realizaciones, Z deriva de un ácido policarboxílico. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático en las composiciones poliméricas de la presente invención comprenden cadenas con la estructura P7:



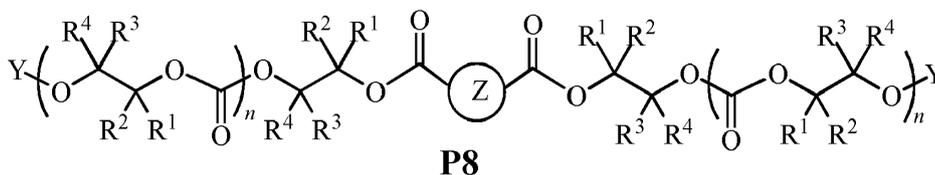
en donde cada uno de R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y , Z y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento, e y' es un número entero entre 1 y 5 inclusive.

5 En realizaciones en las que las cadenas de policarbonato alifático tienen una estructura **P7**, Z representa el esqueleto que contiene carbono (o un enlace en el caso de ácido oxálico) de un ácido policarboxílico, mientras que los grupos éster adyacentes a Z derivan de grupos $-CO_2H$ del ácido policarboxílico. Por ejemplo, si Z derivara de ácido succínico ($HO_2CCH_2CH_2CO_2H$), entonces Z sería $-CH_2CH_2-$ y **P7** tendría la siguiente estructura:



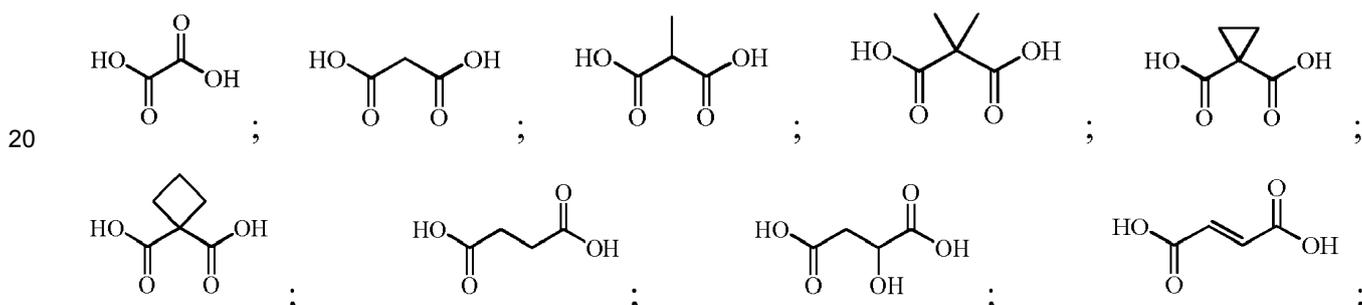
10 en donde cada uno de R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

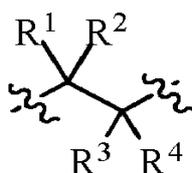
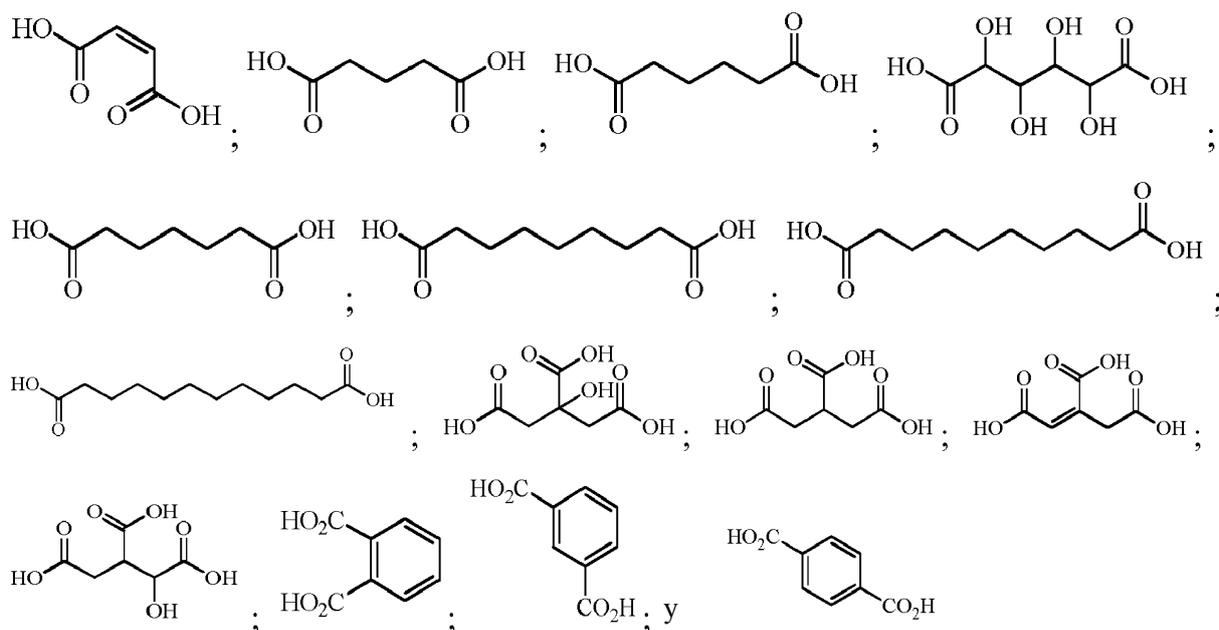
En determinadas realizaciones, Z deriva de un ácido dicarboxílico. En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático en las composiciones de polímero de la presente invención comprenden cadenas con la estructura **P8**:



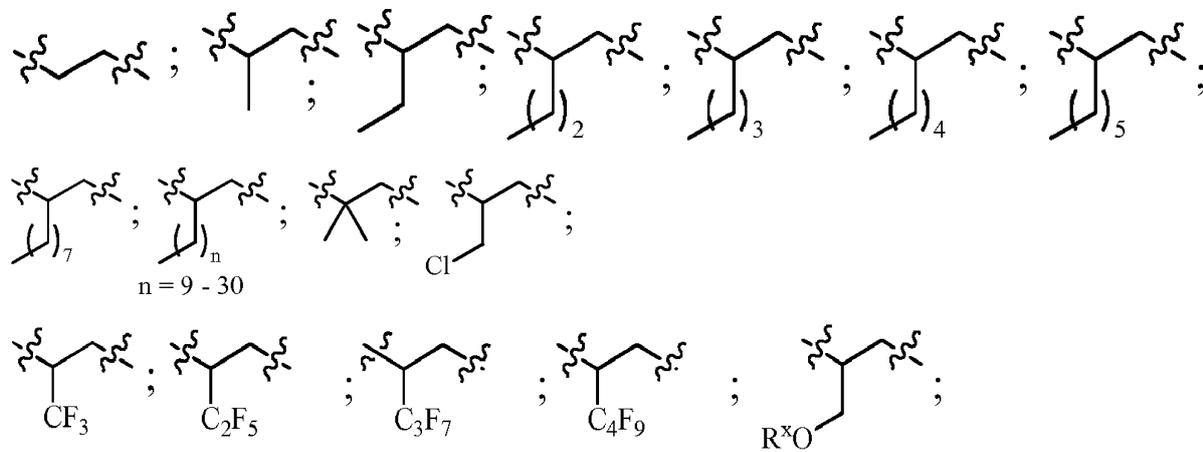
15 En determinadas realizaciones, Z se selecciona del grupo que consiste en: ácido ftálico, ácido isoftálico, ácido tereftálico, ácido maleico, ácido succínico, ácido malónico, ácido glutárico, ácido adípico, ácido pimélico, ácido subérico y ácido azelaico.

En determinadas realizaciones, Z se selecciona del grupo que consiste en:

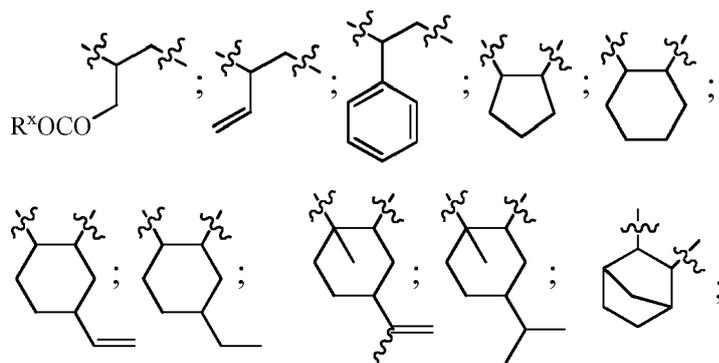


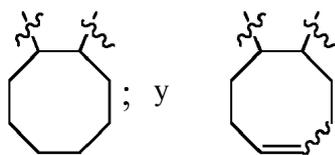


5 En determinadas realizaciones, cada una de las estructuras de este documento se selecciona en forma independiente del grupo que consiste en:

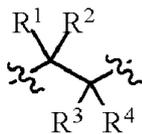


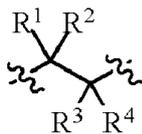
10

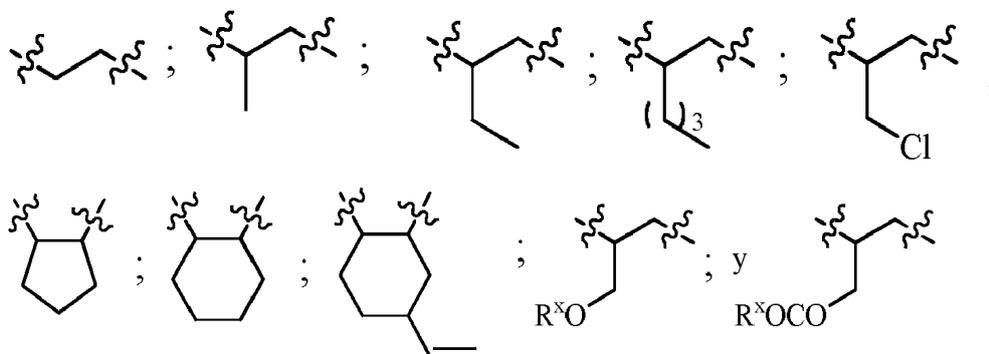




en donde cada R^x es en forma independiente un grupo opcionalmente sustituido seleccionado del grupo que consiste en alifático C₂₋₂₀, heteroalifático C₂₋₂₀, carbocíclico de 3 a 14 miembros, arilo de 6 a 10 miembros, heteroarilo de 5 a 10 miembros y heterocíclico de 3 a 12 miembros.

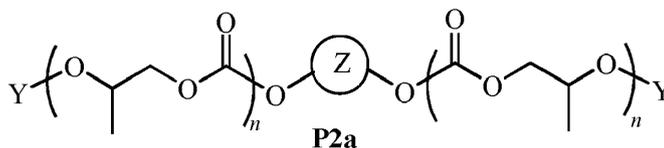


5 En determinadas realizaciones, cada  en las estructuras de este documento se selecciona en forma independiente del grupo que consiste en:



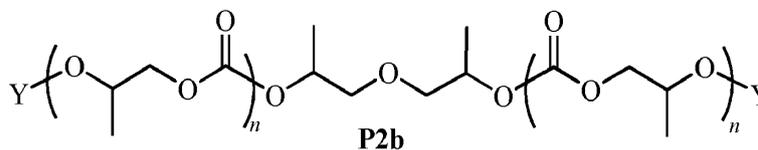
en donde R^x es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

10 En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden:



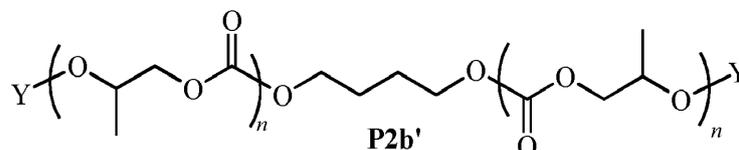
en donde cada uno de  , -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



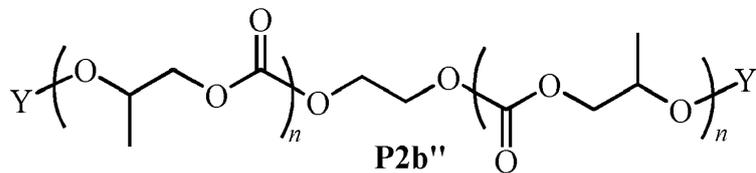
15 en donde cada uno de -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



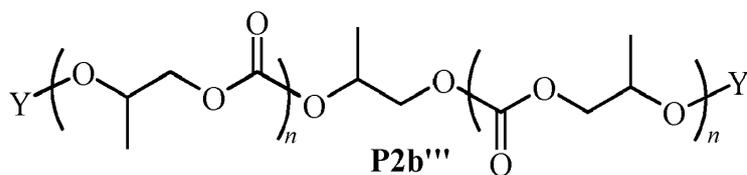
en donde cada uno de -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



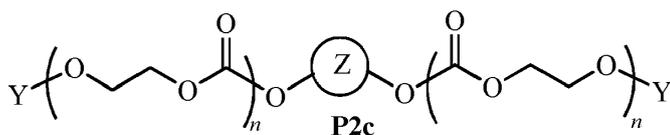
5 en donde cada uno de -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



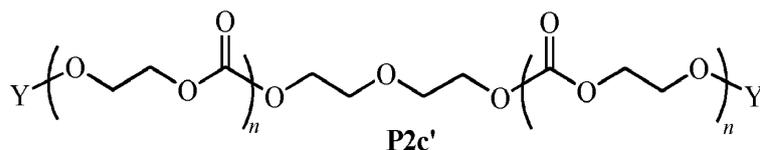
10 en donde cada uno de -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



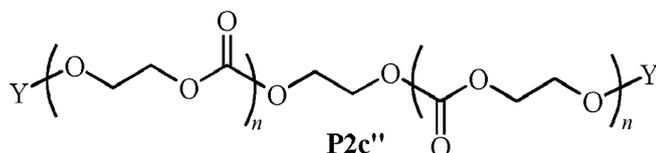
en donde cada uno de \textcircled{Z} , -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

15 En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



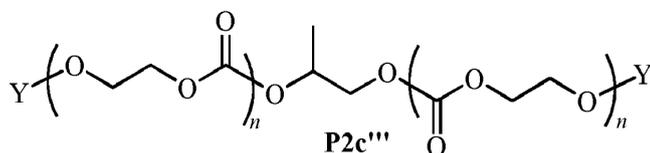
en donde cada uno de -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



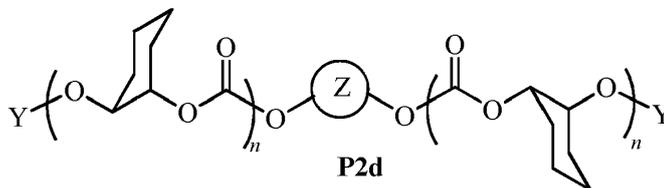
20 en donde cada uno de -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



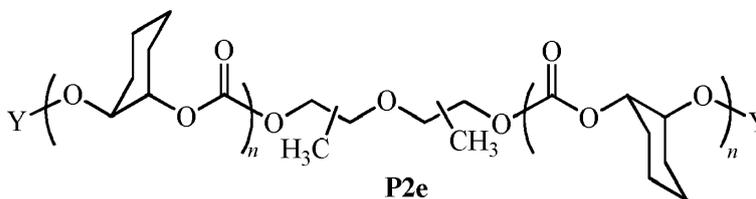
en donde cada uno de -Y y *n* es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



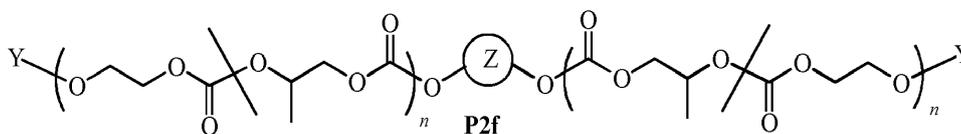
5 en donde cada uno de \textcircled{Z} , -Y y *n* es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



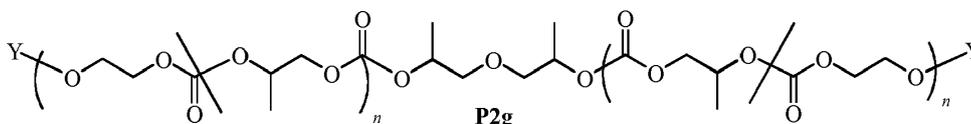
10 en donde cada uno de -Y y *n* es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



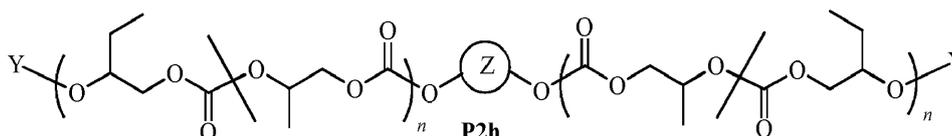
en donde cada uno de \textcircled{Z} , -Y y *n* es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

15 En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



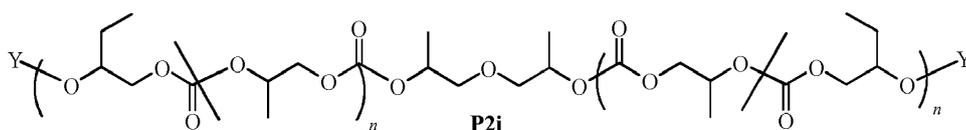
en donde cada uno de -Y y *n* es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



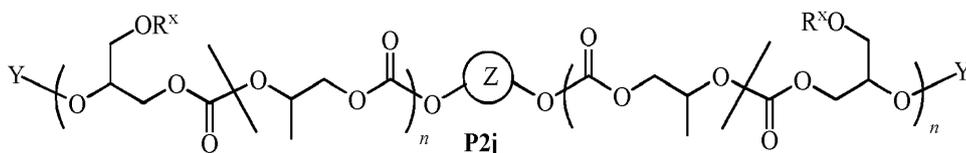
20 en donde cada uno de \textcircled{Z} , -Y y *n* es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



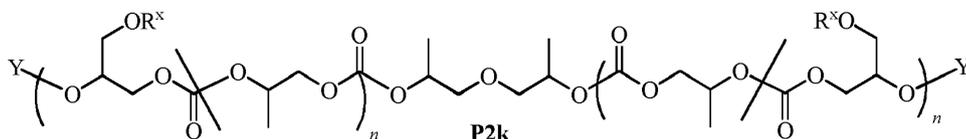
en donde cada uno de -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



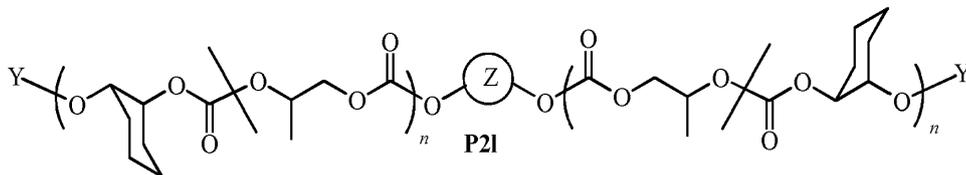
5 en donde cada uno de \textcircled{Z} , -Y, R^x y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



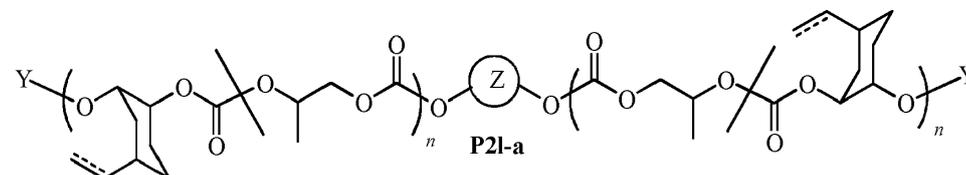
10 en donde cada uno de -Y, R^x y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



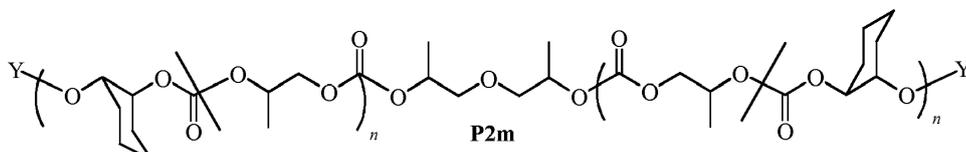
15 en donde cada uno de \textcircled{Z} , -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



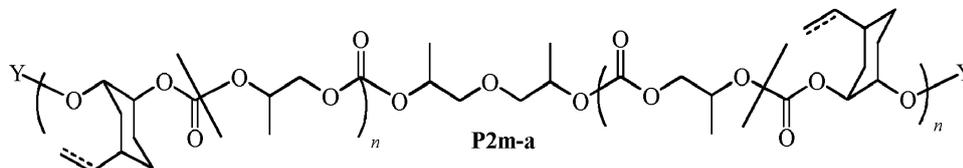
en donde cada uno de \textcircled{Z} , -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento; y cada --- representa en forma independiente un enlace sencillo o doble.

20 En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



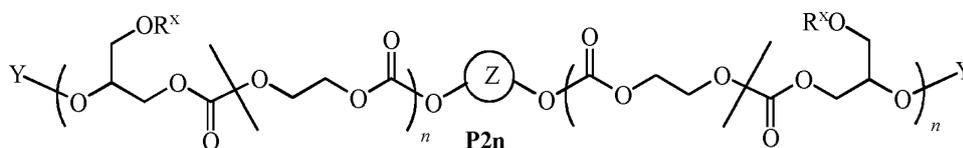
en donde cada uno de -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



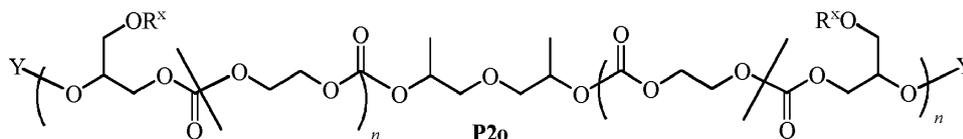
5 en donde cada uno de -Y, --- y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



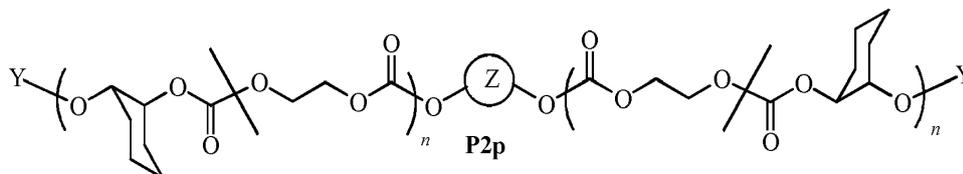
10 en donde cada uno de --- , --- , --- , --- y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



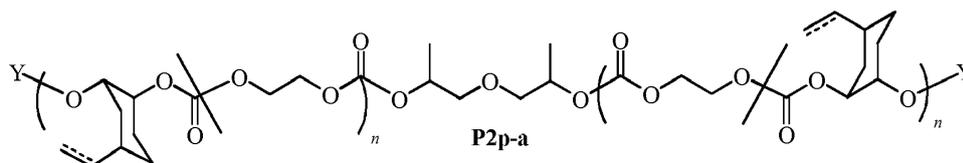
en donde cada uno de -Y, --- , --- y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

15 En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



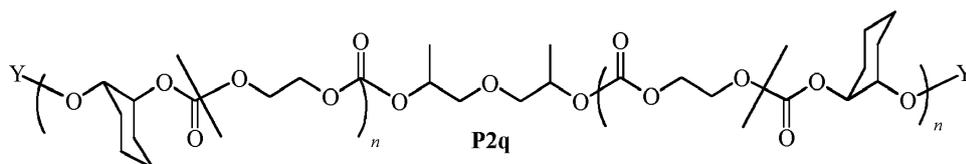
en donde cada uno de --- , --- , --- y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



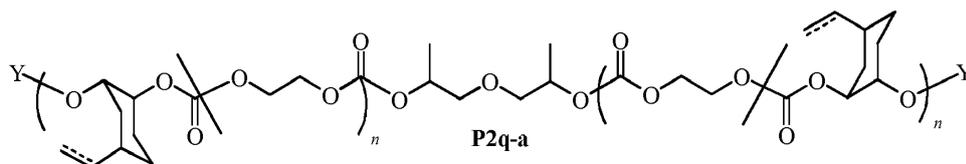
20 en donde cada uno de -Y, --- y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



en donde cada uno de -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

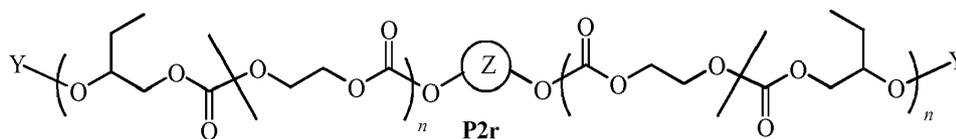
En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



5

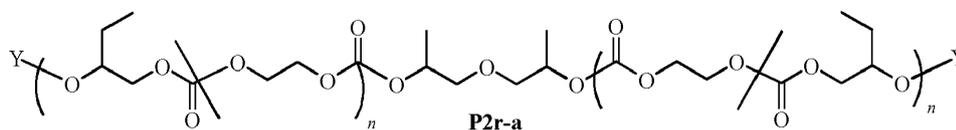
en donde cada uno de -Y,  y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden



10 en donde cada uno de , -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, las cadenas de policarbonato alifático comprenden

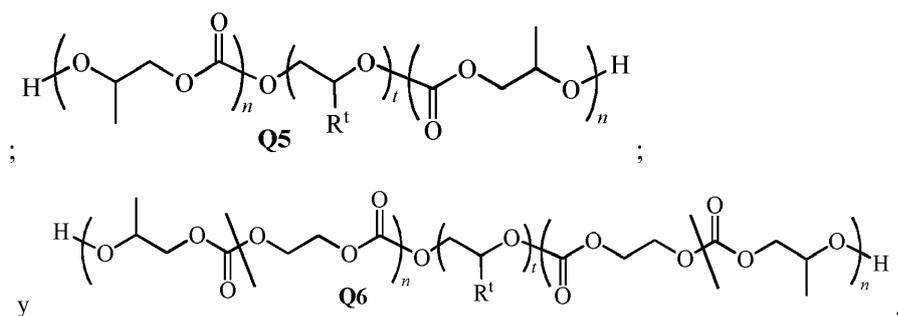


15 en donde cada uno de -Y y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, en los policarbonatos de las estructuras **P2a**, **P2c**, **P2d**, **P2f**, **P2h**, **P2j**, **P2l**, **P2l-**

a, **P2n**, **P2p** y **P2r**,  se selecciona del grupo que consiste en etilenglicol; dietilenglicol; trietilenglicol, 1,3 propano diol; 1,4 butano diol, hexilenglicol, 1,6 hexano diol, propilenglicol, dipropilenglicol, tripropilenglicol y derivados alcoxilados de cualquiera de estos.

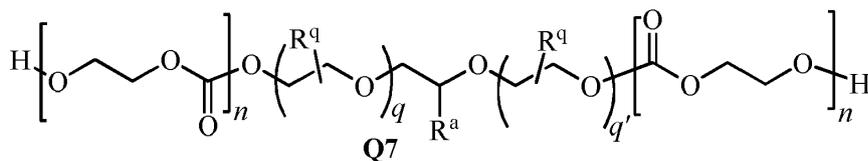
20 Para policarbonatos que comprenden unidades de repetición derivadas de dos o más epóxidos, tales como aquellos representados por las estructuras **P2f** a **P2r**, ilustradas anteriormente, se ha de entender que las estructuras trazadas pueden representar mezclas de isómeros de posición o regioisómeros que no se ilustran explícitamente. Por ejemplo, la unidad de repetición del polímero adyacente a cualquiera de los grupos terminales de las cadenas de policarbonato puede derivar de uno cualquiera de los dos epóxidos que comprende los copolímeros. Por lo tanto, si bien los polímeros pueden trazarse con una unidad de repetición particular conectada a un grupo terminal, las unidades de repetición terminales podrían derivar de cualquiera de los dos epóxidos, y una composición polimérica determinada podría comprender una mezcla de todas las posibilidades en relaciones variables. La relación de estos grupos terminales podría estar influenciada por varios factores que incluyen la relación de los distintos epóxidos utilizados en la polimerización, la estructura del catalizador utilizado, las condiciones de reacción utilizadas (es decir, temperatura, presión, etc.) además del tiempo de adición de los componentes de reacción. De modo similar, si bien los dibujos anteriores pueden mostrar una regioquímica para unidades de repetición derivadas de epóxidos sustituidos, las composiciones poliméricas, en algunos casos, contendrán mezclas de regioisómeros. La regioselectividad de una polimerización determinada puede estar influenciada por numerosos factores que incluyen la estructura del catalizador utilizado y las condiciones de reacción empleadas. Para aclarar, esto significa que la composición representada por la estructura **P2r** anterior puede contener una mezcla de varios compuestos como se muestra en el diagrama que sigue. Este diagrama muestra los isómeros gráficamente para el polímero **P2r**, en donde las estructuras debajo del dibujo de la cadena muestran cada isómero regio y de posición posible para la



en donde t es un número entero entre 1 y 12 inclusive, y R^t es en forma independiente en cada caso -H o -CH₃.

5 En determinadas realizaciones, el agente de transferencia de cadena integrado \textcircled{Z} es un resto derivado de un diol polimérico o un alcohol polihídrico superior. En determinadas realizaciones, dichos alcoholes poliméricos son polioles de poliéter o poliéster. En determinadas realizaciones \textcircled{Z} es un poliol de poliéter que comprende unidades de repetición de etilenglicol o propilenglicol (-OCH₂CH₂O- o -OCH₂CH(CH₃)O-) o combinaciones de estas. En determinadas realizaciones, \textcircled{Z} es un poliol de poliéster que comprende el producto de reacción de un diol y un diácido, o un material derivado de polimerización con apertura de anillo de lactonas.

10 En determinadas realizaciones en donde \textcircled{Z} comprende un diol de poliéter, el poliol de policarbonato alifático tiene una estructura **Q7**:



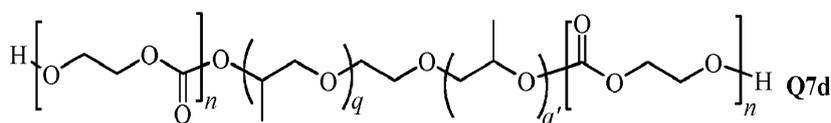
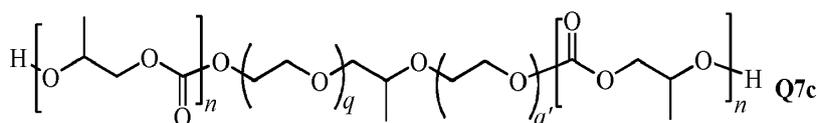
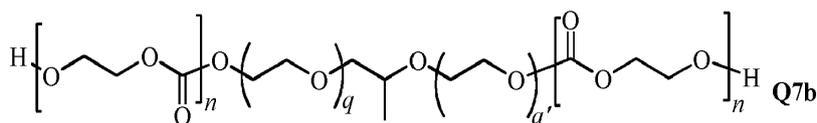
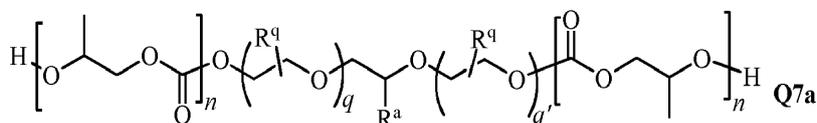
en donde,

R^q es en cada caso en la cadena de polímero independientemente -H o -CH₃;

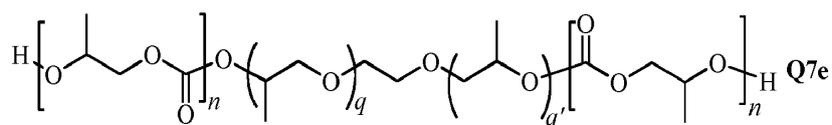
15 R^a es -H o -CH₃;

q y q' son en forma independiente un número entero entre aproximadamente 2 y aproximadamente 40; y n es como se definió anteriormente y como se define en los ejemplos y realizaciones de este documento.

En determinadas realizaciones, un poliol de policarbonato alifático se selecciona del grupo que consiste en:



20

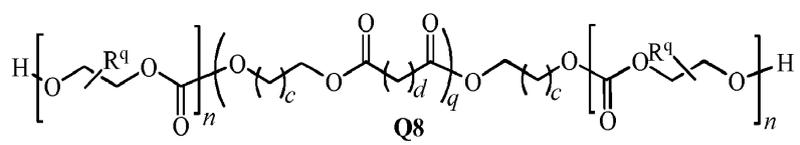


en donde cada uno de R^a, R^q, q, q' y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, en donde los poliols de policarbonato alifático comprenden compuestos que se

- 5 ajustan a la estructura **Q7**, el resto \textcircled{Z} deriva de un polirol de poliéter comercialmente disponible tal como aquellos habitualmente utilizados en la formulación de composiciones de espuma de poliuretano.

En determinadas realizaciones en donde \textcircled{Z} comprende un poliéster diol, el polirol de policarbonato alifático tiene una estructura **Q8**:



- 10 en donde,

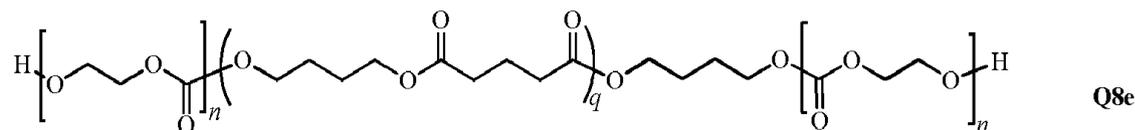
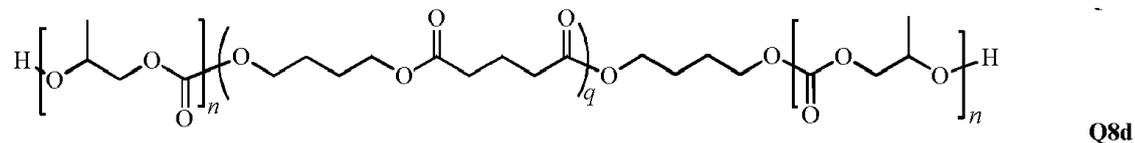
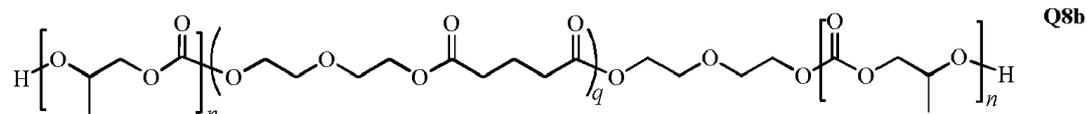
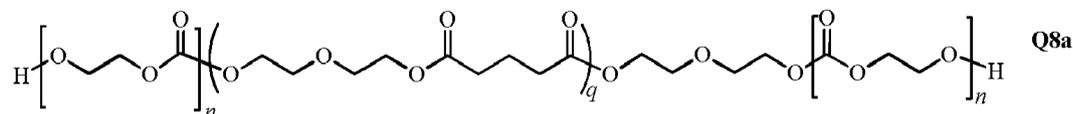
c es en cada caso en la cadena de polímero en forma independiente un número entero entre 0 y 6;

d es en cada caso en la cadena de polímero en forma independiente un número entero entre 1 y 11;

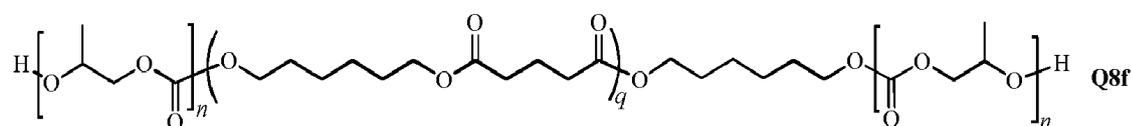
y

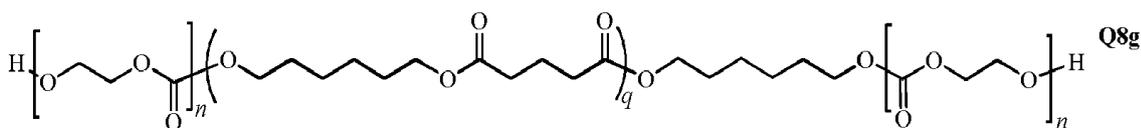
15 cada uno de R^q, n, q y q' es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, un polirol de policarbonato alifático se selecciona del grupo que consiste en:



- 20





en donde cada uno de n y q es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

En determinadas realizaciones, en donde los polioles de policarbonato alifático comprenden compuestos que se

- 5 ajustan a la estructura **Q8**, el resto ^(Z) deriva de un poliol de poliéster comercialmente disponible tal como aquellos típicamente utilizados en la formulación de composiciones de espuma de poliuretano.

II. Reactivos de isocianato

Como se describió anteriormente, las composiciones de la presente invención comprenden reactivos de isocianato. El propósito de estos reactivos de isocianato es reaccionar con los grupos terminales reactivos en los polioles de policarbonato alifático para formar estructuras de peso molecular superior mediante extensión de cadena y/o reticulación.

- 15 La técnica de síntesis de poliuretano está muy avanzada y se conoce en la técnica un gran número de isocianatos y precursores de poliuretano relacionados, que están disponibles comercialmente. Si bien esta sección de la memoria describe isocianatos adecuados para uso en ciertas realizaciones de la presente invención, se ha de entender que está dentro de la habilidad del experto en la técnica de formulación de poliuretano usar isocianatos alternativos junto con las descripciones de la presente invención para formular composiciones adicionales dentro del alcance de la presente invención. Las descripciones de compuestos isocianato adecuados y métodos relacionados se pueden hallar en: Chemistry and Technology of Polyols for Polyurethanes Ionescu, Mihail 2005 (ISBN 978-1-84735-035-0), y H. Ulrich, "Urethane Polymers," Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 1997.

- 20 En determinadas realizaciones, los reactivos de isocianato comprenden dos o más grupos isocianato por molécula. En determinadas realizaciones los reactivos de isocianato son diisocianatos. En otras realizaciones, los reactivos de isocianato son poliisocianatos superiores tales como triisocianatos, tetraisocianatos, polímeros de isocianato u oligómeros, y similares. En determinadas realizaciones, los reactivos de isocianato son poliisocianatos alifáticos o derivados u oligómeros de poliisocianatos alifáticos. En otras realizaciones, los isocianatos son poliisocianatos alifáticos o derivados u oligómeros de poliisocianatos aromáticos. En determinadas realizaciones, las composiciones pueden comprender mezclas de cualquiera de dos o más de los tipos de isocianatos anteriormente mencionados.

- 25 En determinadas realizaciones, el componente de isocianato utilizado en la formulación de los nuevos materiales de la presente invención tiene una funcionalidad de 2 o más. En determinadas realizaciones, el componente de isocianato de los materiales inventivos comprende una mezcla de diisocianatos e isocianatos superiores formulada para lograr un número de funcionalidad particular para una aplicación determinada. En determinadas realizaciones, si la composición inventiva es una espuma flexible o un elastómero blando, el isocianato empleado tiene una funcionalidad de aproximadamente 2. En determinadas realizaciones, dichos isocianatos tienen una funcionalidad entre aproximadamente 2 y aproximadamente 2,7. En determinadas realizaciones, dichos isocianatos tienen una funcionalidad entre aproximadamente 2 y aproximadamente 2,5. En determinadas realizaciones, dichos isocianatos tienen una funcionalidad entre aproximadamente 2 y aproximadamente 2,3. En determinadas realizaciones, dichos isocianatos tienen una funcionalidad entre aproximadamente 2 y aproximadamente 2,2.

- 30 En otras realizaciones, si la composición es una espuma rígida o un termoplástico, el isocianato empleado tiene una funcionalidad mayor que 2. En determinadas realizaciones, dichos isocianatos tienen una funcionalidad entre aproximadamente 2,3 y aproximadamente 4. En determinadas realizaciones, dichos isocianatos tienen una funcionalidad entre aproximadamente 2,5 y aproximadamente 3,5. En determinadas realizaciones, dichos isocianatos tienen una funcionalidad entre aproximadamente 2,6 y aproximadamente 3,1. En determinadas realizaciones, dichos isocianatos tienen una funcionalidad de aproximadamente 3.

- 35 En determinadas realizaciones, un reactivo de isocianato se selecciona del grupo que consiste en: 1,6-hexametilaminadiisocianato (HDI), isofozona diisocianato (IPDI), 4,4' metilen-bis(ciclohexil isocianato) (H₁₂MDI), 2,4-tolueno diisocianato (TDI), 2,6-tolueno diisocianato (TDI), difenilmetano-4,4'-diisocianato (MDI), difenilmetano-2,4'-diisocianato (MDI), xilileno diisocianato (XDI), 1,3-Bis(isocianatometil)ciclohexano (H6-XDI), 2,2,4-trimetilhexametileno diisocianato, 2,4,4-trimetilhexametileno diisocianato (TMDI), m-tetrametilxilileno diisocianato (TMXDI), p-tetrametilxilileno diisocianato (TMXDI), isocianatometil-1,8-ictano diisocianato (TIN), trifenilmetano-4,4',4''triisocianato, Tris(p-isocianatometil)tiosulfato, 1,3-Bis(isocianatometil)benzeno, 1,4-tetrametileno diisocianato, trimetilhexano diisocianato, 1,6-hexametileno diisocianato, 1,4-ciclohexil diisocianato, lisina diisocianato, y mezclas de dos cualquiera de estos.

Los isocianatos adecuados para determinadas realizaciones de la presente invención se comercializan con varios nombres comerciales. Los ejemplos de isocianatos comerciales disponibles incluyen materiales comercializados con

- los nombres comerciales: Desmodur® (Bayer Material Science), Tolonate® (Perstorp), Takenate® (Takeda), Vestanat® (Evonik), Desmotherm® (Bayer Material Science), Bayhydur® (Bayer Material Science), Mondur (Bayer Material Science), Suprasec (Huntsman Inc.), Lupranate® (BASF), Trixene (Baxenden), Hartben® (Benasedo), Ucopol® (Sapici) y Basonat® (BASF). Cada uno de estos nombres comerciales abarca una diversidad de materiales de isocianato disponibles en diversos grados y formulaciones. La selección de materiales de isocianato adecuados comercialmente disponibles como reactivos para producir composiciones de poliuretano para una aplicación particular está dentro de la capacidad del experto en la técnica de tecnología de poliuretano usando las presentes descripciones junto con la información suministrada en las fichas técnicas suministradas por los proveedores previamente mencionados.
- 10 Los isocianatos adicionales adecuados para ciertas realizaciones de la presente invención se comercializan con el nombre comercial Lupranate® (BASF). En determinadas realizaciones, los isocianatos se seleccionan del grupo que consiste en los materiales que se muestran en la Tabla 1:

Tabla 1

Productos	Descripción	% NCO	Func. nominal
<u>Lupranate M</u>	MDI 4,4'	33,5	2
<u>Lupranate MS</u>	MDI 4,4'	33,5	2
<u>Lupranate MI</u>	Mezcla MDI 2,4' y 4,4'	33,5	2
<u>Lupranate LP30</u>	MDI 4,4' líquido, puro	33,1	2
<u>Lupranate 227</u>	Mezcla MDI monomérico/modificado	32,1	2
MDI modificado con carbodiimida			
<u>Lupranate 5143</u>	MDI 4,4' modificado con carbodiimida	29,2	2,2
<u>Lupranate MM103</u>	MDI 4,4' modificado con carbodiimida	29,5	2,2
<u>Lupranate 219</u>	MDI 4,4' modificado con carbodiimida	29,2	2,2
<u>Lupranate 81</u>	MDI modificado con carbodiimida	29,5	2,2
<u>Lupranate 218</u>	MDI modificado con carbodiimida	29,5	2,2
MD polimérico (PMDI)			
<u>Lupranate M10</u>	Polimérico funcionalidad baja	31,7	2,2
<u>Lupranate R2500U</u>	Variante MDI polimérico	31,5	2,7
<u>Lupranate M20S</u>	Polimérico funcionalidad media	31,5	2,7
<u>Lupranate M20FB</u>	Polimérico funcionalidad media	31,5	2,7
<u>Lupranate M70L</u>	Polimérico funcionalidad alta	31	3
<u>Lupranate M200</u>	Polimérico funcionalidad alta	30	3,1
Mezclas y derivados de MDI polimérico			
<u>Lupranate 241</u>	Polimérico funcionalidad baja	32,6	2,3
<u>Lupranate 230</u>	Polimérico funcionalidad baja	32,5	2,3

ES 2 749 324 T3

Productos	Descripción	% NCO	Func. nominal
<u>Lupranate 245</u>	Polimérico funcionalidad baja	32,3	2,3
<u>Lupranate TF2115</u>	Polimérico funcionalidad media	32,3	2,4
<u>Lupranate 78</u>	Polimérico funcionalidad media	32	2,3
<u>Lupranate 234</u>	Polimérico funcionalidad baja	32	2,4
<u>Lupranate 273</u>	Polimérico de baja viscosidad	32	2,5
<u>Lupranate 266</u>	Polimérico de baja viscosidad	32	2,5
<u>Lupranate 261</u>	Polimérico de baja viscosidad	32	2,5
<u>Lupranate 255</u>	Polimérico de baja viscosidad	31,9	2,5
<u>Lupranate 268</u>	Polimérico de baja viscosidad	30,6	2,4
Prepolímeros de MDI selectos			
<u>Lupranate 5010</u>	Prepolímero funcional superior	28,6	2,3
<u>Lupranate 223</u>	Derivado de MDI puro de baja viscosidad	27,5	2,2
<u>Lupranate 5040</u>	Funcionalidad media, baja viscosidad	26,3	2,1
<u>Lupranate 5110</u>	Prepolímero de MDI polimérico	25,4	2,3
<u>Lupranate MP102</u>	Prepolímero MDI 4,4'	23	2
<u>Lupranate 5090</u>	Prepolímero MDI 4,4' especial	23	2,1
<u>Lupranate 5050</u>	Prepolímero NCO medio, funcionalidad media	21,5	2,1
<u>Lupranate 5030</u>	Prepolímero MDI especial	18,9	NA
<u>Lupranate 5080</u>	Prepolímero MDI 2,4' potenciado	15,9	2
<u>Lupranate 5060</u>	Prepolímero peso molecular superior, funcionalidad baja	15,5	2
<u>Lupranate 279</u>	Prepolímero especial, funcionalidad baja	14	2
<u>Lupranate 5070</u>	Prepolímero MDI especial	13	2
<u>Lupranate 5020</u>	Funcionalidad baja, NCO bajo	9,5	2
Tolueno diisocianato (TDI)			
<u>Lupranate T80-</u>	80/20:2,4/2,6 TDI	48,3	2
<u>Lupranate T80-</u>	TDI de gran acidez	48,3	2
<u>Lupranate 8020</u>	80/20:TDI/MDI polimérico	44,6	2,1

Otros isocianatos adecuados para ciertas realizaciones de la presente invención se comercializan con el nombre comercial Desmodur® de Bayer Material Science. En determinadas realizaciones, los isocianatos se seleccionan del grupo que consiste en los materiales que se muestran en la Tabla 2:

Tabla 2

Nombre comercial	Descripción
Desmodur® 2460 M	Difenilmetano diisocianato monomérico con alto contenido de 2,4'-isómero
Desmodur® 44 M	Difenilmetano-4,4'-diisocianato (MDI) monomérico.
Desmodur® 44 MC	Desmodur 44 MC Flakes es un difenilmetano-4,4'-diisocianato (MDI) monomérico.
Desmodur® BL 1100/1	Poliisocianato aromático bloqueado basado en TDI
Desmodur® BL 1265 MPA/X	Poliisocianato aromático bloqueado basado en TDI
Desmodur® BL 3175 SN	Poliisocianato alifático bloqueado basado en HDI
Desmodur® BL 3272 MPA	Poliisocianato alifático bloqueado basado en HDI
Desmodur® BL 3370 MPA	Poliisocianato alifático bloqueado basado en HDI
Desmodur® BL 3475 BA/SN	Resina de uretano estufada, reticulada alifática basada en HDI/IPDI
Desmodur® BL 3575/1 MPA/SN	Poliisocianato alifático bloqueado basado en HDI
Desmodur® BL 4265 SN	Poliisocianato alifático bloqueado basado en IPDI
Desmodur® BL 5375	Poliisocianato alifático bloqueado basado en H 12 MDI
Desmodur® CD-L	Desmodur CD-L es un isocianato modificado basado en difenilmetano-4,4'-diisocianato.
Desmodur® CD-S	Desmodur CD-S es un isocianato modificado basado en difenilmetano-4,4'-diisocianato.
Desmodur® D XP 2725	Poliisocianato hidrófilamente modificado
Desmodur® DA-L	Poliisocianato alifático hidrófilo basado en hexametileno diisocianato
Desmodur® DN	Poliisocianato alifático de baja volatilidad
Desmodur® E 1160	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® E 1361 BA	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® E 1361 MPA/X	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato

ES 2 749 324 T3

Nombre comercial	Descripción
Desmodur® E 14	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® E 15	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato.
Desmodur® E 1660	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato.
Desmodur® E 1750 PR	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® E 20100	Prepolímero de poliisocianato modificado basado en difenilmetano diisocianato.
Desmodur® E 21	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato (MDI).
Desmodur® E 2190 X	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato (MDI)
Desmodur® E 22	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato.
Desmodur® E 2200/76	Desmodur E 2200/76 es un prepolímero basado en (MDI) con isómeros.
Desmodur® E 23	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato (MDI).
Desmodur® E 29	Prepolímero de poliisocianato basado en difenilmetano diisocianato.
Desmodur® E 305	Desmodur E 305 es un prepolímero de NCO alifático altamente lineal basado en hexametileno diisocianato.
Desmodur® E 3265 MPA/SN	Prepolímero de poliisocianato alifático basado en hexametileno diisocianato (HDI)
Desmodur® E 3370	Prepolímero de poliisocianato alifático basado en hexametileno diisocianato
Desmodur® E XP 2605	Prepolímero de poliisocianato basado en tolueno diisocianato y difenilmetano diisocianato
Desmodur® E XP 2605	Prepolímero de poliisocianato basado en tolueno diisocianato y difenilmetano diisocianato
Desmodur® E XP 2715	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en 2,4'-difenilmetano diisocianato (2,4'-MDI) y un hexanodiol adipato
Desmodur® E XP 2723	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato (MDI).
Desmodur® E XP 2726	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en 2,4'-difenilmetano diisocianato (2,4'-MDI)
Desmodur® E XP 2727	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato.
Desmodur® E XP 2762	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato (MDI).
Desmodur® H	Diisocianato alifático monomérico
Desmodur® HL	Poliisocianato aromático/alifático basado en tolueno diisocianato/hexametileno diisocianato
Desmodur® I	Diisocianato cicloalifático monomérico.

ES 2 749 324 T3

Nombre comercial	Descripción
Desmodur® IL 1351	Poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® IL 1451	Poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® IL BA	Poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® IL EA	Resina de poliisocianato aromática basada en tolueno diisocianato
Desmodur® L 1470	Poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® L 67 BA	Poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® L 67 MPA/X	Poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® L 75	Poliisocianato aromático basado en tolueno diisocianato
Desmodur® LD	Isocianato de baja funcionalidad basado en hexametileno diisocianato (HDI)
Desmodur® LS 2424	Difenilmetano diisocianato monomérico con alto contenido de 2,4'-isómero
Desmodur® MT	Prepolímero de poliisocianato basado en difenilmetano diisocianato
Desmodur® N 100	Poliisocianato alifático (HDI biuret)
Desmodur® N 3200	Poliisocianato alifático (HDI biuret de baja viscosidad)
Desmodur® N 3300	Poliisocianato alifático (trímero HDI)
Desmodur® N 3368 BA/SN	Poliisocianato alifático (trímero HDI)
Desmodur® N 3368 SN	Poliisocianato alifático (trímero HDI)
Desmodur® N 3386 BA/SN	Poliisocianato alifático (trímero HDI)
Desmodur® N 3390 BA	Poliisocianato alifático (trímero HDI)
Desmodur® N 3390 BA/SN	Poliisocianato alifático (trímero HDI)
Desmodur® N 3400	Poliisocianato alifático (HDI uretdiona)
Desmodur® N 3600	Poliisocianato alifático (trímero HDI de baja viscosidad)
Desmodur® N 3790 BA	Poliisocianato alifático (trímero HDI de alta funcionalidad)
Desmodur® N 3800	Poliisocianato alifático (trímero HDI flexibilizante)
Desmodur® N 3900	Resina de poliisocianato alifático de baja viscosidad basada en hexametileno diisocianato

ES 2 749 324 T3

Nombre comercial	Descripción
Desmodur® N 50 BA/MPA	Poliisocianato alifático (HDI biuret)
Desmodur® N 75 BA	Poliisocianato alifático (HDI biuret)
Desmodur® N 75 MPA	Poliisocianato alifático (HDI biuret)
Desmodur® N 75 MPA/X	Poliisocianato alifático (HDI biuret)
Desmodur® NZ 1	Poliisocianato alifático
Desmodur® PC-N	Desmodur PC-N es un difenil-metano-4,4'-diisocianato (MDI) modificado
Desmodur® PF	Desmodur PF es un difenil-metano-4,4'-diisocianato (MDI) modificado
Desmodur® PL 340, 60 % BA/SN	Poliisocianato alifático bloqueado basado en IPDI
Desmodur® PL 350	Poliisocianato alifático bloqueado basado en HDI
Desmodur® RC	Disolución de poliisocianurato de tolueno diisocianato (TDI) en acetato de etilo.
Desmodur® RE	Disolución de trifenilmetano-4,4',4"-trisisocianato en acetato de etilo
Desmodur® RFE	Disolución de tris(p-isocianatofenil)tiofosfato en acetato de etilo
Desmodur® RN	Disolución de un poliisocianurato con grupos NCO alifáticos y aromáticos en acetato de etilo.
Desmodur® T 100	2,4'-Tolueno diisocianato (TDI) puro
Desmodur® T 65 N	2,4- y 2,6-tolueno diisocianato (TDI) en la relación 67 : 33
Desmodur® T 80	2,4- y 2,6-tolueno diisocianato (TDI) en la relación 80 : 20
Desmodur® T 80 P	2,4- y 2,6-tolueno diisocianato (TDI) en la relación 80 : 20 con un aumento del contenido de cloro hidrolizable
Desmodur® VH 20 N	Poliisocianato basado en difenilmetano diisocianato
Desmodur® VK	Productos Desmodur VK re mezclas de difenilmetano-4,4'-diisocianato (MDI) con isómeros y homólogos funcionales superiores
Desmodur® VKP 79	Desmodur VKP 79 es un difenilmetano-4,4'-diisocianato (MDI) modificado con isómeros y homólogos.
Desmodur® VKS 10	Desmodur VKS 10 es una mezcla de difenilmetano-4,4'-diisocianato (MDI) con isómeros y homólogos funcionales superiores (PMDI).
Desmodur® VKS 20	Desmodur VKS 20 es una mezcla de difenilmetano-4,4'-diisocianato (MDI) con isómeros y homólogos funcionales superiores (PMDI).

ES 2 749 324 T3

Nombre comercial	Descripción
Desmodur® VKS 20 F	Desmodur VKS 20 F es una mezcla de difenilmetano-4,4'-diisocianato (MDI) con isómeros y homólogos funcionales superiores
Desmodur® VKS 70	Desmodur VKS 70 es una mezcla de difenilmetano-4,4'-diisocianato (MDI) con isómeros y homólogos
Desmodur® VL	Poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato
Desmodur® VP LS 2078/2	Poliisocianato alifático bloqueado basado en IPDI
Desmodur® VP LS 2086	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato
Desmodur® VP LS 2257	Poliisocianato alifático bloqueado basado en HDI
Desmodur® VP LS 2371	Prepolímero de poliisocianato alifático basado en isoforona diisocianato.
Desmodur® VP LS 2397	Desmodur VP LS 2397 es un prepolímero lineal basado en polipropilén éter glicol y difenilmetano diisocianato (MDI). Contiene
Desmodur® W	Diisocianato cicloalifático monomérico
Desmodur® W/1	Diisocianato cicloalifático monomérico
Desmodur® XP 2404	Desmodur XP 2404 es una mezcla de poliisocianatos monoméricos
Desmodur® XP 2406	Prepolímero de poliisocianato alifático basado en diisocianato de isoforona
Desmodur® XP 2489	Poliisocianato alifático
Desmodur® XP 2505	Desmodur XP 2505 es un prepolímero que contiene grupos éter basados en difenilmetano-4,4'-diisocianatos (MDI) con isómeros y superior
Desmodur® XP 2551	Poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato
Desmodur® XP 2565	Resina de poliisocianato alifático de baja viscosidad basada en diisocianato de isoforona.
Desmodur® XP 2580	Poliisocianato alifático basado en hexametileno diisocianato
Desmodur® XP 2599	Prepolímero alifático que contiene grupos éter y basado en hexametileno-1,6-diisocianato (HDI)
Desmodur® XP 2617	Desmodur XP 2617 es un prepolímero NCO muy lineal basado en hexametileno diisocianato.
Desmodur® XP 2665	Prepolímero de poliisocianato aromático basado en difenilmetano diisocianato (MDI)
Desmodur® XP 2675	Poliisocianato alifático (trímero de HDI altamente funcional)
Desmodur® XP 2679	Poliisocianato alifático (trímero de HDI alofanato)

Nombre comercial	Descripción
Desmodur® XP 2714	Poliisocianato alifático silano-funcional basado en hexametileno diisocianato
Desmodur® XP 2730	Poliisocianato alifático de baja viscosidad (HDI uretdiona)
Desmodur® XP 2731	Poliisocianato alifático (trímero de HDI alofanato)
Desmodur® XP 2742	Poliisocianato alifático modificado (Trímero HDI), contiene SiO ₂ – nanopartículas

Los isocianatos adicionales adecuados para determinadas realizaciones de la presente invención se comercializan con el nombre comercial Tolonate® (Perstorp). En determinadas realizaciones, los isocianatos se seleccionan del grupo que consiste en los materiales que se exponen en la Tabla 3:

5 Tabla 3

Tolonate™ D2	un poliisocianato alifático bloqueado, provisto con 75 % sólidos en disolvente aromático
Tolonate™ HDB	un poliisocianato alifático libre de disolvente viscoso
Tolonate™ HDB-LV	un poliisocianato alifático de baja viscosidad libre de disolvente
Tolonate™ HDB 75 B	un poliisocianato alifático, provisto con 75% sólidos en metoxi propil acetato
Tolonate™ HDB 75 BX	un poliisocianato alifático, provisto con 75% sólidos
Tolonate™ HDT	un poliisocianato de viscosidad media, alifático, libre de disolvente
Tolonate™ HDT-LV	un poliisocianato de baja viscosidad, alifático, libre de disolvente
Tolonate™ HDT-LV2	un poliisocianato alifático de muy baja viscosidad, libre de disolvente
Tolonate™ HDT 90	un poliisocianato alifático, basado en trímero HDI (isocianurato), provisto con 90% sólidos
Tolonate™ HDT 90 B	un poliisocianato alifático, basado en trímero HDI (isocianurato), provisto con 90% sólidos
Tolonate™ IDT 70 B	un poliisocianato alifático, basado en trímero HDI (isocianurato), provisto con 70% sólidos
Tolonate™ IDT 70 S	un poliisocianato alifático, basado en trímero HDI (isocianurato), provisto con 70% sólidos
Tolonate™ X FD 90 B	un poliisocianato alifático de secado rápido y alta funcionalidad basado en trímero HDI, provisto con 90% sólidos

Otros isocianatos adecuados para ciertas realizaciones de la presente invención se comercializan con el nombre comercial Mondur® de Bayer Material Science. En determinadas realizaciones, los isocianatos se seleccionan del grupo que consiste en los materiales de la Tabla 4:

ES 2 749 324 T3

Tabla 4

Nombre comercial	Descripción
MONDUR 445	Poliisocianato mezcla TDI/MDI; mezcla de tolueno diisocianato y difenilmetano diisocianato polimérico; peso NCO 44,5-45,2%
MONDUR 448	prepolímero de difenilmetano diisocianato (pMDI) polimérico modificado; peso NCO 27,7%; viscosidad 140 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 152; funcionalidad 2,2
MONDUR 489	difenilmetano diisocianato (pMDI) polimérico modificado; peso NCO 31,5%; viscosidad 700 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 133; funcionalidad 3,0
MONDUR 501	difenilmetano diisocianato monomérico modificado (mMDI); prepolímero de poliéster terminado con isocianato; peso NCO 19,0%; viscosidad 1,100 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 221; funcionalidad 2
MONDUR 541	difenilmetano diisocianato polimérico (pMDI); aglutinante para productos de madera compuestos y como materia prima en formulaciones adhesivas; peso NCO 31,5%; viscosidad 200 mPa·s @ 25°C
MONDUR 582	difenilmetano diisocianato polimérico (pMDI); aglutinante para productos de madera compuestos y como materia prima en formulaciones adhesivas; peso NCO 31,0%; viscosidad 200 mPa·s @ 25°C
MONDUR 541-Light	difenilmetano diisocianato polimérico (pMDI); peso NCO 32,0%; viscosidad 70 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 131; funcionalidad 2,5
MONDUR 841	prepolímero de MDI polimérico modificado; NCO, peso 30,5%; acidez, peso 0,02%; equivalente amina 132; Viscosidad a 25°C, mPa·s 350; gravedad específica a 25°C 1,24; punto de inflamación, PMCC, °F >200
MONDUR 1437	difenilmetano diisocianato modificado (mMDI); prepolímero de poliéster terminado con isocianato; peso NCO 10,0%; viscosidad 2.500 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 420; funcionalidad 2
MONDUR 1453	difenilmetano diisocianato modificado (mMDI); prepolímero de poliéster terminado con isocianato basado en polipropileno éter glicol (PPG); peso NCO 16,5%; viscosidad 600 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 254; funcionalidad 2
MONDUR 1515	prepolímero de difenilmetano diisocianato polimérico, modificado (pMDI); utilizado en la producción de espumas de poliuretano rígidas, especialmente para la industria de electrodomésticos; peso NCO 30,5%; viscosidad 350 mPa·s @ 25°C
MONDUR 1522	4,4-difenilmetano diisocianato monomérico, modificado (mMDI); peso NCO 29,5%; viscosidad 50 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 143; funcionalidad 2,2
MONDUR MA-2300	MDI monomérico modificado, 4,4'-difenilmetano diisocianato modificado con alofanato (mMDI); peso NCO 23,0%; viscosidad 450 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 183; funcionalidad 2,0
MONDUR MA 2600	MDI monomérico modificado, 4,4'-difenilmetano diisocianato modificado con alofanato (mMDI); peso NCO 26,0%; viscosidad 100 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 162; funcionalidad 2,0
MONDUR MA 2601	mezcla diisocianato aromático, 4,4'-difenilmetano diisocianato modificado con alofanato (MDI) mezclado con difenilmetano diisocianato polimérico (pMDI) que contiene 2,4'-isómero; peso NCO 29,0%; viscosidad 60 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 145; funcionalidad 2,2

ES 2 749 324 T3

Nombre comercial	Descripción
MONDUR MA 2603	Prepolímero MDI; prepolímero terminado con isocianato (MDI) mezclado con un 4,4'-difenilmetano diisocianato modificado con alofanato (MDI); peso NCO 16,0%; viscosidad 1,050 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 263; funcionalidad 2,0
MONDUR MA-2902	MDI monomérico modificado, 4,4'-difenilmetano diisocianato modificado con alofanato (mMDI); peso NCO 29,0%; viscosidad 40 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 145; funcionalidad 2,0
MONDUR MA-2903	MDI monomérico, modificado; prepolímero terminado en isocianato (MDI); peso NCO 19,0%; viscosidad 400 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 221; funcionalidad 2,0
MONDUR MA-2904	Prepolímero de poliéter MDI modificado con alofanato; peso NCO 12,0%; viscosidad 1.800 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 350; funcionalidad de 2,0
MONDUR MB	isocianato difuncional de grado alta pureza, difenilmetano 4,4'-diisocianato; utilizado en la producción de elastómeros de poliuretano, adhesivos, recubrimientos y productos de poliuretano intermedios; sólido o líquido incoloro; gravedad específica @ 50°C±15,5 1,19; punto de inflamación 202°C PMCC; viscosidad (en forma fundida) 4,1 mPa·S; densidad aparente 10 lb/gal (condensado) o 9,93 lb/gal (fundido); temperatura de congelamiento 39°C
MONDUR MLQ	difenilmetano diisocianato monomérico; utilizado en espumas, elastómeros fundidos, recubrimientos y adhesivos; aspecto líquido amarillo claro ligero, % en peso NCO 33,4%; 1,19 gravedad específica a 25°C, punto de inflamación 196°C, DIN 51758; temperatura de congelamiento 11-15°C
MONDUR MQ	isocianato difuncional de grado alta pureza, difenilmetano 4,4'-diisocianato (MDI); utilizado en la producción de elastómeros de poliuretano sólidos, recubrimientos adhesivos y en productos de poliuretano intermedios; aspectos sólido o líquido incoloro; gravedad específica 1,19 @ 50°C; punto de inflamación 202°C PMCC; viscosidad 4,1 mPa·S; densidad aparente 10 lb./gal (condensado) o 9,93 lb./gal (fundido); temperatura de congelamiento 39°C
MONDUR MR	difenilmetano diisocianato polimérico (pMDI); peso NCO 31,5%; viscosidad 200 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 133; funcionalidad 2,8
MONDUR MR LIGHT	difenilmetano diisocianato polimérico (pMDI); peso NCO 31,5%; viscosidad 200 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 133; funcionalidad 2,8
MONDUR MR-5	difenilmetano diisocianato polimérico (pMDI); peso NCO 32,5%; viscosidad 50 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 129; funcionalidad 2,4
MONDUR MRS	difenilmetano diisocianato polimérico rico en 2,4' (pMDI); peso NCO 31,5%; viscosidad 200 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 133; funcionalidad 2,6
MONDUR MRS 2	difenilmetano diisocianato polimérico rico en 2,4' (pMDI); peso NCO 33,0%; viscosidad 25 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 127; funcionalidad 2,2
MONDUR MRS-4	difenilmetano diisocianato polimérico rico en 2,4' (pMDI); peso NCO 32,5%; viscosidad 40 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 129; funcionalidad 2,4
MONDUR MRS-5	difenilmetano diisocianato polimérico rico en 2,4' (pMDI); peso NCO 32,3%; viscosidad 55 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 130; funcionalidad 2,4
MONDUR PC	4,4' difenilmetano diisocianato modificado (mMDI); peso NCO 25,8%; viscosidad 145 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 163; funcionalidad 2,1
MONDUR PF	prepolímero de 4,4' difenilmetano diisocianato (mMDI) modificado; peso NCO 22,9%;

Nombre comercial	Descripción
	viscosidad 650 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 183; funcionalidad 2
MONDUR TD-65	tolueno diisocianato monomérico (TDI); mezcla 65/35 de 2,4 y 2,6 TDI; peso NCO 48%; viscosidad 3 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 87,5; funcionalidad 2
MONDUR TD-80 GRADO A	tolueno diisocianato monomérico (TDI); mezcla 80/20 del isómero 2,4 y 2,6; peso NCO 48%; viscosidad 5 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 87,5; funcionalidad 2
MONDUR TD-80 GRADO A/GRADO B	tolueno diisocianato monomérico (TDI); mezcla 80/20 del isómero 2,4 y 2,6; peso NCO 48%; viscosidad 5 mPa·s @ 25°C; peso equivalente 87,5; funcionalidad 2

5 En determinadas realizaciones, se dan a conocer una o más de las composiciones de isocianato anteriormente descritas en una formulación típica en una mezcla secundaria A conocida en la técnica de fabricación de espumas de poliuretano. Dichas mezclas secundarias A pueden comprender prepolímeros formados por la reacción de un exceso molar de uno o más poliisocianatos con moléculas reactivas que comprenden grupos funcionales reactivos tales como alcoholes, aminas, tioles, carboxilatos y similares. Las mezclas secundarias A pueden además comprender disolventes, tensioactivos, estabilizantes y otros aditivos conocidos en la técnica.

III. Mezclas secundarias B

10 Como se describió anteriormente, las composiciones de la presente invención comprenden las llamadas mezclas secundarias B que comprenden uno o más polioles de policarbonato alifático descritos en la Sección I anterior. Los polioles de policarbonato alifático adicionales para la formulación de las mezclas secundarias B de la presente invención se describen en el documento PCT/US2010/028362, publicado como WO/2010/028362.

15 En determinadas realizaciones, la mezcla secundaria B comprende los polioles de policarbonato alifático en combinación con uno o más polioles adicionales y/o uno o más aditivos. En determinadas realizaciones, los aditivos se seleccionan del grupo que consiste en: disolventes, agua, catalizadores, tensioactivos, agentes de soplado, colorantes, estabilizantes de UV, retardantes de llamas, antimicrobianos, plastificantes, abridores de celdas, composiciones antiestática, compatibilizadores y similares. En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B comprenden moléculas pequeñas reactivas adicionales tales como aminas, alcoholes, tioles o ácidos carboxílicos que participan en las reacciones de formación de enlaces con isocianatos.

20 Polioles adicionales

25 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden polioles de policarbonato alifático como se describió anteriormente en combinación con uno o más polioles adicionales tales como los tradicionalmente utilizados en las composiciones de espumas de poliuretano. En realizaciones en las que están presentes polioles adicionales, pueden comprender hasta aproximadamente 95 por ciento en peso del contenido de poliol total con el equilibrio de la mezcla de poliol compuesto por uno o más polioles de policarbonato alifático descritos en la Sección I anterior y en los ejemplos y realizaciones específicas de este documento.

30 En realizaciones en las que las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden o derivan de una mezcla de uno o más polioles de policarbonato alifático y uno o más polioles adicionales, los polioles adicionales se seleccionan del grupo que consiste en polioles de poliéter, polioles de poliéster, polioles de poliestireno, polioles de poliéter-carbonato, carbonatos de poliéter-éster, y mezclas de cualquiera de dos o más de estos. En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden o derivan de una mezcla de uno o más polioles de policarbonato alifático descritos en este documento y uno o más de otros polioles seleccionados del grupo que consiste en materiales comercialmente disponibles con los nombres comerciales: Voranol® (Dow), SpecFlex® (Dow), Tercarol® (Dow), Caradol® (Shell), Hyperliter®, Acclaim® (Bayer Material Science), Ultracel® (Bayer Material Science), Desmophen® (Bayer Material Science) y Arcol® (Bayer Material Science).

35 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden mezclas que contienen polioles de poliéter en combinación con uno o más polioles de policarbonato alifático como se describe en la presente invención. En determinadas realizaciones, los polioles de poliéter comprenden polietilenglicol. En determinadas realizaciones, los polioles de poliéter comprenden polipropilenglicol.

40 Los polioles de poliéter que pueden estar presentes incluyen aquellos que se pueden obtener por métodos conocidos, por ejemplo, los polioles de poliéter se pueden producir por polimerización aniónica con hidróxidos alcalinos tales como hidróxido de sodio o hidróxido de potasio o alcoholatos alcalinos, tales como metilado de sodio, etilato de sodio, etilato de potasio o isopropilato de potasio como catalizadores y con la adición de por lo menos una

molécula iniciadora que contiene 2 a 8, preferiblemente 3 a 8, hidrógenos reactivos o por polimerización catiónica con ácidos de Lewis tales como pentacloruro de antimonio, trifluoruro de boro eterato, etc., tierras blanqueadoras como catalizadores de uno o más óxidos de alquileo con 2 a 4 carbonos en el radical alquileo. Se puede utilizar cualquier óxido de alquileo adecuado tal como óxido de 1,3-propileno, óxido de 1,2- y 2,3 butileno, óxidos de amileno, óxido de estireno, y preferiblemente óxido de etileno y óxido de propileno y mezclas de estos óxidos. Los polioles de polialquileo poliéter se pueden preparar a partir de otros materiales de partida como tetrahidrofurano y mezclas de óxido de alquileo-tetrahidrofurano; epihalohidrinatas como epiclorhidrina; además de óxidos de aralquileo tales como óxido de estireno. Los polioles de polialquileo poliéter pueden tener grupos hidroxilo primarios o secundarios, preferiblemente grupos hidroxilo secundarios a partir de la adición de óxido de propileno a un iniciador, ya que estos grupos reaccionan más lentamente. Incluidos entre los polioles de poliéter se encuentran polioxietilenglicol, polioxipropilenglicol, polioxibutilenglicol, politetrametilenglicol, copolímeros en bloque, por ejemplo combinaciones de polioxipropileno y polioxietilenglicoles, poli-1,2-oxibutileno y polioxietilenglicoles, poli-1,4-tetrametileno y polioxietilenglicoles, y glicoles de copolímeros preparados a partir de mezclas o adición secuencial de dos o más óxidos de alquileo. Los polioles de polialquileo éster se pueden preparar mediante cualquier procedimiento conocido, como, por ejemplo, los procedimientos descritos por Wurtz en Encyclopedia of Chemical Technology, Vol. 7, pág. 257-262, publicados por Interscience Publishers, Inc. (1951) o en la patente de EE. UU. núm. 1.922.459. Los poliéteres incluyen productos de adición de óxido de alquileo de alcoholes polihídricos tales como etilenglicol, propilenglicol, dipropilenglicol, trimetilenglicol, 1,2-butanodiol, 1,5-pentanodiol, 1,6-hexanodiol, 1,7-heptanodiol, hidroquinona, resorcinol glicerol, glicerina, 1,1,1-trimetilol-propano, 1,1,1-trimetiloletano, pentaeritritol, 1,2,6-hexanotriol, α -metil glucósido, sacarosa y sorbitol. También se incluyen dentro del término "alcohol polihídrico" compuestos derivados de fenol tales como 2,2-bis(4-hidroxifenil)-propano, comúnmente conocido como Bisfenol A. Se prefiere particularmente en la composición de poliol por lo menos un poliol que se inicie con un compuesto que tenga por lo menos dos grupos amina primaria o secundaria, un alcohol polihídrico que tenga 4 o más grupos hidroxilo, como sacarosa, o una mezcla de iniciadores que empleen un alcohol polihídrico que tenga por lo menos 4 grupos hidroxilo y compuestos que tengan por lo menos dos grupos amina primaria o secundaria. Los iniciadores de amina orgánica adecuados que se pueden condensar con óxidos de alquileo incluyen aminas aromáticas tales como anilina, N-alquilfenileno-diaminas, 2,4'-, 2,2'- y 4,4'-metilenodianilina, 2,6- o 2,4-toluenodiamina, toluenodiaminas vecinas, o-cloroanilina, p-aminoanilina, 1,5-diaminonaftaleno, metileno dianilina, los distintos productos de condensación de anilina y formaldehído, y los diaminotoluenos isoméricos; y aminas alifáticas tales como mono-, di- y trialcanolaminas, etilendiamina, propilendiamina, dietilentriamina, metilamina, triisopropanolamina, 1,3-diaminopropano, 1,3-diaminobutano y 1,4-diaminobutano. Las aminas preferidas incluyen monoetanolamina, toluenodiaminas vecinas, etilendiaminas y propilendiamina. Incluso otra clase de polioles de poliéter aromáticos contemplados para uso en la presente invención son el poliol basado en Mannich y el aducto de óxido de alquileo – de resina de fenol/formaldehído/alcanolamina, frecuentemente llamado poliol "Mannich", como aquel descrito en las patentes de EE. UU. núm. 4.883.826; 4.939.182; y 5.120.815.

En determinadas realizaciones si están presentes polioles adicionales, comprenden entre aproximadamente 5 por ciento en peso y aproximadamente 95 por ciento en peso del contenido de poliol total con el equilibrio de la mezcla de poliol compuesto por uno o más polioles de policarbonato alifático descritos en la Sección I anterior y en los ejemplos y realizaciones específicas de este documento. En determinadas realizaciones, hasta aproximadamente 75 por ciento en peso del contenido de poliol total de la mezcla secundaria B es poliol de policarbonato alifático. En determinadas realizaciones, hasta aproximadamente 50 por ciento en peso del contenido de poliol total de la mezcla secundaria B es poliol de policarbonato alifático. En determinadas realizaciones, hasta aproximadamente 40 por ciento en peso, hasta aproximadamente 30 por ciento en peso, hasta aproximadamente 25 porcentaje en peso, hasta aproximadamente 20 porcentaje en peso, hasta aproximadamente 15 porcentaje en peso o hasta aproximadamente 10 porcentaje en peso del contenido de poliol total de la mezcla secundaria B es poliol de policarbonato alifático. En determinadas realizaciones, por lo menos aproximadamente 5 por ciento en peso del contenido de poliol total de la mezcla secundaria B es poliol de policarbonato alifático. En determinadas realizaciones, por lo menos aproximadamente 10 por ciento en peso del contenido de poliol total de la mezcla secundaria B es poliol de policarbonato alifático. En determinadas realizaciones, por lo menos aproximadamente 15 por ciento en peso, por lo menos aproximadamente 20 por ciento en peso, por lo menos aproximadamente 25 por ciento en peso, por lo menos aproximadamente 40 porcentaje en peso o por lo menos aproximadamente 50 por ciento en peso, del contenido de poliol total de la mezcla secundaria B es poliol de policarbonato alifático.

Catalizadores

En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B contienen uno o más catalizadores para la reacción del poliol (y agua, si está presente) con el polisocianato. Se puede utilizar cualquier catalizador de uretano adecuado, incluidos compuestos de amina terciaria y compuestos organometálicos. Los compuestos amina terciaria ilustrativos incluyen trietilendiamina, N-metilmorfolina, N,N-dimetilciclohexilamina, pentametildietilentriamina, tetrametilendiamina, 1-metil-4-dimetilaminoetilpiperazina, 3-metoxi-N-dimetilpropilamina, N-etilmorfolina, dietiletanolamina, N-coccomorfolina, N,N-dimetil-N',N'-dimetil isopropilpropilendiamina, N,N-dietil-3-dietilaminopropilamina dimetilbencilamina, 1,8-Diazabicycloundec-7-eno (DBU), 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octano (DABCO) triazabicyclodeceno (TBD) y N-metiltriazaabicyclodeceno. (MTBD) Los catalizadores organometálicos ilustrativos incluyen catalizadores de organomercurio, organoplomo, organohierro y organoestaño, en donde se prefieren los catalizadores de organoestaño. Los catalizadores de estaño adecuados incluyen cloruro estañoso,

sales de estaño de ácido carboxílico tales como dibutilestaño dilaurato, además de otros compuestos organometálicos tales como aquellos descritos en la patente de EE. UU. núm. 2.846.408 y en otros sitios. Un catalizador para la trimerización de poliisocianatos, que resulta en un poliisocianurato, tal como un alcóxido de metal alcalino, puede además emplearse opcionalmente en este documento. Dichos catalizadores se utilizan en una cantidad que mensurablemente aumenta la tasa de formación de poliuretano o poliisocianurato.

En determinadas realizaciones, si las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden catalizadores, los catalizadores comprenden materiales a base de estaño. En determinadas realizaciones, los catalizadores de estaño incluidos en las mezclas secundarias B se seleccionan del grupo que consiste en: di-butil estaño dilaurato, dibutilbis(lauril)estanoato, dibutiltinbis(isooctilmercapto acetato) y dibutiltinbis(isooctilmaleato), octanoato de estaño y mezclas de cualquiera de dos o más de estos.

En determinadas realizaciones, los catalizadores incluidos en las mezclas secundarias B comprenden aminas terciarias. En determinadas realizaciones, los catalizadores incluidos en las mezclas secundarias B se seleccionan del grupo que consiste en: DABCO, pentametildipropilentriamina, bis(dimetilamino etil éter), pentametildietilentriamina, sal de DBU fenol, dimetilciclohexilamina, 2,4,6-tris(N,N-dimetilaminometil)fenol (DMT-30), 1,3,5-tris(3-dimetilaminopropil)hexahidro-s-triazina, sales de amonio y combinaciones o formulaciones de cualquiera de estos.

Las cantidades de catalizador típicas oscilan entre 0,001 y 10 partes de catalizador por 100 partes en peso de polioli total en la mezcla secundaria B. En determinadas realizaciones, los niveles de catalizador en la formulación, cuando se usan, oscilan entre aproximadamente 0,001 pph (partes en peso por cien) y aproximadamente 3 pph en base a la cantidad del polioli presente en la mezcla secundaria B. En determinadas realizaciones, los niveles de catalizador oscilan entre aproximadamente 0,05 pph y aproximadamente 1 pph, o entre aproximadamente 0,1 pph y aproximadamente 0,5 pph.

Agentes de soplado

En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención contienen agentes de soplado. Los agentes de soplado pueden ser agentes de soplado químicos (típicamente moléculas que reaccionan con los componentes secundarios A para liberar CO₂ u otros compuestos volátiles) o pueden ser agentes de soplado físicos (típicamente moléculas con un punto de ebullición bajo que se evaporan durante la formación de espuma. Se conocen en la técnica muchos agentes de soplado y se pueden aplicar a las composiciones secundarias B de la presente invención de conformidad con la tecnología convencional. La elección del agente de soplado y de las cantidades añadidas puede ser una cuestión de experimentación de rutina.

En determinadas realizaciones, el agente de soplado comprende un agente de soplado químico. En determinadas realizaciones, está presente agua como un agente de soplado. El agua funciona como agente de soplado reaccionando con una porción del isocianato en la mezcla secundaria A para producir gas dióxido de carbono. De manera similar, se puede incluir ácido fórmico como agente de soplado. El ácido fórmico funciona como agente de soplado reaccionando con una porción del isocianato para producir dióxido de carbono y monóxido de carbono.

En determinadas realizaciones, el agua está presente en una cantidad entre 0,5 y 20 partes por 100 partes en peso del polioli en la composición secundaria B. En determinadas realizaciones, el agua está presente en una cantidad comprendida entre aproximadamente 1 y 10 partes, entre aproximadamente 2 y 8 partes, o entre aproximadamente 4 y 6 partes por 100 partes en peso de polioli en la composición secundaria B. En determinadas realizaciones, es ventajoso no exceder 2 partes de agua, no exceder 1,5 partes de agua, no exceder 0,75 partes de agua. En determinadas realizaciones, es ventajoso que no haya agua presente.

En determinadas realizaciones, el ácido fórmico está presente en una cantidad comprendida entre 0,5 y 20 partes por 100 partes en peso del polioli en la composición secundaria B. En determinadas realizaciones, el ácido fórmico está presente en una cantidad comprendida entre aproximadamente 1 y 10 partes, entre aproximadamente 2 y 8 partes, o entre aproximadamente 4 y 6 partes por 100 partes en peso de polioli en la composición secundaria B.

En determinadas realizaciones, se pueden usar agentes de soplado físicos. Los agentes de soplado físicos adecuados incluyen hidrocarburos, moléculas orgánicas que contienen flúor, clorocarburos, acetona, metil formiato y dióxido de carbono. En algunas realizaciones, las moléculas orgánicas que contienen flúor comprenden compuestos perfluorados, clorofluorocarbonados, hidroclofluorocarbonados e hidrofurocarbonados. Los hidrofuroalcanos adecuados son compuestos C₁₋₄ que incluyen difluorometano (R-32), 1,1,1,2-tetrafluoroetano (R-134a), 1,1-difluoroetano (R-152a), difluorocloroetano (R-142b), trifluorometano (R-23), heptafluoropropano (R-227a), hexafluoropropano (R-136), 1,1,1-trifluoroetano (R-133), fluoroetano (R-161), 1,1,1,2,2-pentafluoropropano (R-245fa), pentafluoropropileno (R2125a), 1,1,1,3-tetrafluoropropano, tetrafluoropropileno (R-2134a), 1,1,2,3,3-pentafluoropropano y 1,1,1,3,3-pentafluoro-*n*-butano.

En determinadas realizaciones, cuando está presente un agente de soplado hidrofurocarbonado en la composición secundaria B, se selecciona del grupo que consiste en: tetrafluoroetano (R-134a), pentafluoropropano (R-245fa) y pentafluorobutano (R-365).

- Los hidrocarburos adecuados para uso como agentes de soplado incluyen hidrocarburos no halogenados tales como isómeros de butano, isobutano, 2,3-dimetilbutano, *n*- e *i*-pentano, isómeros de hexano, isómeros de heptano y cicloalcanos que incluyen ciclopentano, ciclohexano y cicloheptano. Los hidrocarburos preferidos para uso como agentes de soplado incluyen ciclopentano y notablemente *n*-pentano e iso-pentano. En determinadas realizaciones, la composición secundaria B comprende un agente de soplado físico seleccionado del grupo que consiste en tetrafluoroetano (R-134a), pentafluoropropano (R-245fa), pentafluorobutano (R-365), ciclopentano, *n*-pentano e iso-pentano.
- En determinadas realizaciones en las que está presente un agente de soplado físico, se usa en una cantidad comprendida entre aproximadamente 1 y aproximadamente 20 partes por 100 partes en peso del poliol en la composición secundaria B. En determinadas realizaciones, el agente de soplado físico está presente entre 2 y 15 partes, o entre 4 y 10 partes por 100 partes en peso del poliol en la composición secundaria B.
- Moléculas pequeñas reactivas
- En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención incluyen una o más moléculas reactivas hacia isocianatos. En determinadas realizaciones, las moléculas pequeñas reactivas incluidas en las mezclas secundarias B inventivas comprenden moléculas orgánicas que tienen uno o más grupos funcionales seleccionados del grupo que consiste en alcoholes, aminas, ácidos carboxílicos, tioles y combinaciones de cualquiera de dos o más de estos.
- En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención incluyen uno o más alcoholes. En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B incluyen alcoholes polihídricos.
- En determinadas realizaciones, las moléculas pequeñas reactivas en las mezclas secundarias B inventivas comprenden alcoholes dihídricos. En determinadas realizaciones, el alcohol dihídrico comprende un diol C₂₋₄₀. En determinadas realizaciones, el alcohol dihídrico se selecciona del grupo que consiste en: 1,2-etanodiol, 1,2-propanodiol, 1,3-propanodiol, 1,2-butanodiol, 1,3-butanodiol, 1,4-butanodiol, 1,5-pentanodiol, 2,2-dimetilpropano-1,3-diol, 2-butil-2-etilpropano-1,3-diol, 2-metil-2,4-pentano diol, 2-etil-1,3-hexano diol, 2-metil-1,3-propano diol, 1,5-hexanodiol, 1,6-hexanodiol, 1,8-octanodiol, 1,10-decanodiol, 1,12-dodecanodiol, 2,2,4,4-tetrametilciclobutano-1,3-diol, 1,3-ciclopentanodiol, 1,2-ciclohexanodiol, 1,3-ciclohexanodiol, 1,4-ciclohexanodiol, 1,2-ciclohexanodimetanol, 1,3-ciclohexanodimetanol, 1,4-ciclohexanodimetanol, 1,4-ciclohexanodietanol, isosorbida, glicerol monoésteres, glicerol monoéteres, trimetilolpropano monoésteres, trimetilolpropano monoéteres, pentaeritritol diésteres, pentaeritritol diéteres y derivados alcoxilados de cualquiera de estos.
- En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva en las mezclas secundarias B inventivas comprende un alcohol dihídrico seleccionado del grupo que consiste en: dietilenglicol, trietilenglicol, tetraetilenglicol y poli(etilenglicol) superior.
- En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva incluida en las mezclas secundarias B inventivas comprende un derivado alcoxilado de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en: un diácido, un diol o un hidroxilácido. En determinadas realizaciones, los derivados alcoxilados comprenden compuestos etoxilados o propoxilados.
- En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva incluida en las mezclas secundarias B comprende un diol polimérico. En determinadas realizaciones, un diol polimérico se selecciona del grupo que consiste en poliéteres, poliésteres, poliolefinas terminadas en hidroxil, poliéter-copolíesteres, poliéter policarbonatos, policarbonato-copolíesteres y análogos alcoxilados de cualquiera de estos.
- En algunas realizaciones, una molécula pequeña reactiva incluida en las mezclas secundarias B inventivas comprende un triol o alcohol polihídrico superior. En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva se selecciona del grupo que consiste en: glicerol, 1,2,4-butanotriol, 2-(hidroximetil)-1,3-propanodiol; hexano trioles, trimetilol propano, trimetilol etano, trimetilolhexano, 1,4-ciclohexanotrimetanol, pentaeritritol mono ésteres, pentaeritritol mono éteres y análogos alcoxilados de cualquiera de estos. En determinadas realizaciones, los derivados alcoxilados comprenden compuestos etoxilados o propoxilados.
- En algunas realizaciones, una molécula pequeña reactiva comprende un alcohol polihídrico con cuatro a seis grupos hidroxil. En determinadas realizaciones, un co-reaccionante comprende dipentaeritritol o un análogo alcoxilado de este. En determinadas realizaciones, un co-reaccionante comprende sorbitol o un análogo alcoxilado de este.
- En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva comprende un ácido hidroxicarboxílico que tiene la fórmula general (HO)_xQ(COOH)_y, en donde Q es un radical hidrocarbonado lineal o ramificado que contiene 1 a 12 átomos de carbono, y *x* e *y* son cada uno números enteros entre 1 y 3. En determinadas realizaciones, un co-reaccionante comprende un ácido diol carboxílico. En determinadas realizaciones, un co-reaccionante comprende un ácido bis(hidroxilaquil) alcanoico. En determinadas realizaciones, un co-reaccionante comprende un ácido bis(hidroxilmetil) alcanoico. En determinadas realizaciones el ácido diol carboxílico se selecciona del grupo que consiste en ácido 2,2 bis-(hidroximetil)-propanoico (ácido dimetilolpropiónico, DMPA) ácido 2,2-bis(hidroximetil)

butanoico (ácido dimetilolbutanoico; DMBA), ácido dihidroxisuccínico (ácido tartárico) y ácido 4,4'-bis(hidroxifenil) valérico. En determinadas realizaciones, un co-reaccionante comprende un ácido N,N-bis(2-hidroxiálquil)carboxílico.

En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva comprende un alcohol polihídrico que comprende uno o más grupos amino. En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva comprende un amino diol.

5 En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva comprende un diol que contiene un grupo amino terciario. En determinadas realizaciones, un amino diol se selecciona del grupo que consiste en: dietanolamina (DEA), *N*-metildietanolamina (MDEA), *N*-etildietanolamina (EDEA), *N*-butildietanolamina (BDEA), *N,N*-bis(hidroxietil)- α -amino piridina, dipropanolamina, diisopropanolamina (DIPA), *N*-metildiisopropanolamina, Diisopropanol-*p*-toluidina, *N,N*-Bis(hidroxietil)-3-cloroanilina, 3-dietilaminopropano-1,2-diol, 3-dimetilaminopropano-1,2-diol y *N*-hidroxietilpiperidina. En determinadas realizaciones, un co-reaccionante comprende un diol que contiene un grupo amino cuaternario. En determinadas realizaciones, un co-reaccionante que comprende un grupo amino cuaternario es una sal de ácido o derivado cuaternizado de cualquiera de los amino alcoholes anteriormente descritos.

15 En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva se selecciona del grupo que consiste en: poliaminas inorgánicas u orgánicas que tienen un promedio de aproximadamente 2 o más grupos amina primaria y/o secundaria, polialcoholes, ureas y combinaciones de dos o más de estos. En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva se selecciona del grupo que consiste en: dietilentriamina (DETA), etilendiamina (EDA), meta-xililendiamina (MXDA), aminoetilendiamina (AEEA), 2-metil pentano diamina y similares, y sus mezclas. Son también adecuadas para la práctica de la presente invención propilendiamina, butilendiamina, hexametilendiamina, ciclohexilendiamina, fenilendiamina, tolilendiamina, 3,3-diclorobencideno, 4,4'-metileno-bis-(2-cloroanilina), 3,3-dicloro-4,4-diamino difenilmetano y aminas primarias y/o secundarias sulfonadas. En determinadas realizaciones, la molécula pequeña reactiva se selecciona del grupo que consiste en hidrazina, hidrazinas sustituidas, productos de reacción de hidriazina y similares, y mezclas de estos. En determinadas realizaciones, una molécula pequeña reactiva es un polialcohol, incluidos aquellos que tienen entre 2 y 12 átomos de carbono, preferiblemente entre 2 y 8 átomos de carbono, como etilenglicol, dietilenglicol, neopentilglicol, butanodiol, hexanodiol y similares, y mezclas de estos. Las ureas adecuadas incluyen urea y sus derivados, y similares, y mezclas de estas.

25 En determinadas realizaciones, las moléculas pequeñas reactivas que contienen por lo menos un átomo de nitrógeno básico se seleccionan del grupo que consiste en: aminas primarias mono-, bis- o polialcoxiladas, alifáticas, cicloalifáticas, aromáticas o heterocíclicas, *N*-metil dietanolamina, *N*-etil dietanolamina, *N*-propil dietanolamina, *N*-isopropil dietanolamina, *N*-butil dietanolamina, *N*-isobutil dietanolamina, *N*-oleil dietanolamina, *N*-estearil dietanolamina, amina grasa de aceite de coco etoxilada, *N*-alil dietanolamina, *N*-metil diisopropanolamina, *N*-etil diisopropanolamina, *N*-propil diisopropanolamina, *N*-butil diisopropanolamina, ciclohexil diisopropanolamina, *N,N*-dietoxilanolina, *N,N*-dietoxil toluidina, *N,N*-dietoxil-1-aminopiridina, *N,N'*-dietoxil piperazina, dimetil-bis-etoxil hidrazina, *N,N'*-bis-(2-hidroxietil)-*N,N'*-diethylhexahidro-fenilendiamina, *N*-12-hidroxietil piperazina, aminas polialcoxiladas, metil dietanolamina propoxilada, *N*-metil-*N,N*-bis-3-aminopropilamina, *N*-(3-aminopropil)-*N,N'*-dimetil etilendiamina, *N*-(3-aminopropil)-*N*-metil etanolamina, *N,N'*-bis-(3-aminopropil)-*N,N'*-dimetil etilendiamina, *N,N'*-bis-(3-aminopropil)-piperazina, *N*-(2-aminoetil)-piperazina, *N,N'*-bisoxietil propilendiamina, 2,6-diaminopiridina, dietanolaminoacetamida, dietanolamidopropionamida, *N,N*-bisoxietilfenil tiosemicarbazida, *N,N*-bis-oxietilmetil semicarbazida, *p,p'*-bis-aminometil dibencil metilamina, 2,6-diaminopiridina, 2-dimetilaminometil-2-metilpropanol, 3-diol. En determinadas realizaciones, los agentes extensores de cadenas son compuestos que contienen dos grupos amino. En determinadas realizaciones, los agentes extensores de cadenas se seleccionan del grupo que consiste en: etilendiamina, 1,6-hexametilendiamina y 1,5-diamino-1-metil-pentano.

Aditivos

Además de los componentes anteriormente mencionados, las mezclas secundarias B de la presente invención pueden opcionalmente contener varios aditivos conocidos en la técnica de tecnología de espuma de poliuretano. Dichos aditivos pueden incluir, aunque sin limitarse a ello, compatibilizadores, colorantes, tensioactivos, retardantes de llamas, compuestos antiestática, antimicrobianos, estabilizantes de UV, plastificantes y abridores de celdas.

Colorantes

50 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden uno o más colorantes adecuados. Muchos productos de espuma se codifican por color durante la fabricación para identificar el grado del producto, ocultar el color amarillento o convertirlo en un producto de consumo. El método histórico para colorear espuma consistía en mezclar pigmentos o tintes tradicionales. Los agentes colorantes inorgánicos típicos incluían dióxido de titanio, óxidos de hierro y óxido de cromo. Pigmentos orgánicos originados a partir de tintes azo/diazo, ftalohalocianinas y dioxazinas, además de negro de carbono. Los problemas típicos de estos colorantes incluían la alta viscosidad, tendencias abrasivas, inestabilidad de la espuma, migración del color y una gama limitada de colores disponibles. Los avances recientes en el desarrollo de colorantes unidos a polioles se describen en:

55 Miley, J. W.; Moore, P. D. "Reactive Polymeric Colorants For Polyurethane", Proceedings Of The SPI-26th Annual Technical Conference; Technomic: Lancaster, Pa., 1981; 83-86.

Moore, P. D.; Miley, J. W.; Bates, S. H.; "New Uses For Highly Miscible Liquid Polymeric Colorants In The Manufacture of Colored Urethane Systems"; Proceedings of the SPI-27th Annual Technical/Marketing Conference; Technomic: Lancaster, Pa., 1982; 255-261.

5 Bates, S. H.; Miley, J. W. "Polyol-Bound Colorants Solve Polyurethane Color Problems"; Proceedings Of The SPI-30th Annual Technical/ Marketing Conference; Technomic: Lancaster, Pa., 1986; 160-165

Vielee, R. C.; Haney, T. V. "Polyurethanes"; en Coloring of Plastics; Webber, T. G., Ed., Wiley-Interscience: Nueva York, 1979, 191-204.

Estabilizantes de UV

10 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden uno o más estabilizantes de UV adecuados. Los poliuretanos basados en isocianatos aromáticos típicamente formarán sombras oscuras de amarillo al envejecerse con la exposición a la luz. Una revisión de los fenómenos de la exposición a la intemperie del poliuretano se presenta en: Davis, A.; Sims, D. Weathering Of Polymers; Applied Science: Londres, 1983, 222-237. El color amarillento no es un problema para la mayoría de las aplicaciones de espuma. Se han utilizado agentes de protección contra la luz, como hidroxibenzotriazoles, zinc dibutil tiocarbamato, butilcatecol 2,6-diterciario, hidroxibenzofenonas, aminas impedidas y fosfitos para mejorar la estabilidad a la luz de los poliuretanos. Los pigmentos de color se han utilizado con éxito.

Retardantes de llamas

20 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden uno o más retardantes de llamas adecuados. Las espumas de poliuretano flexible de celda abierta de baja densidad poseen gran área superficial y gran permeabilidad al aire, y por lo tanto se quemarán debido a la aplicación de fuentes suficientes de combustión y oxígeno. Los retardantes de llamas a menudo se añaden para reducir esta inflamabilidad. La opción del retardante de llamas para cualquier espuma específica a menudo depende de la aplicación de servicio a la que esté destinada esa espuma y al escenario de pruebas de inflamabilidad que rija esa aplicación. Los aspectos de inflamabilidad que pueden estar influenciados por aditivos incluyen posibilidad de inflamación inicial, índice de combustión y evolución de humo.

25 Los retardantes de llamas más utilizados son los fosfato ésteres clorados, parafinas cloradas y polvos de melamina. Estas y muchas otras composiciones están disponibles de proveedores químicos de especialidades. Se ha expuesto una revisión de este tema en: Kurila, W. C.; Papa, A. J. Flame Retardancy of Polymeric Materials, Vol. 3; Marcel Dekker: Nueva York, 1975, 1-133.

30 Agentes bacteriostáticos

Bajo determinadas condiciones de calor y gran humedad, las espumas de poliuretano son susceptibles al ataque de microorganismos. Si esto resulta una preocupación, se añaden aditivos contra bacterias, levaduras u hongos a la espuma durante la fabricación. En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden uno o más agentes bacteriostáticos adecuados.

35 Plastificantes

40 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden uno o más plastificantes adecuados. Los líquidos no reactivos se han utilizado para ablandar una espuma o para reducir la viscosidad a fin de mejorar el procesamiento. El efecto de ablandamiento se puede compensar usando un poliol de peso equivalente inferior, de modo tal de obtener una estructura polimérica reticulada superior. Estos materiales aumentan la densidad de la espuma y a menudo afectan adversamente las propiedades físicas.

Abridores de celdas

45 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden uno o más abridores de celdas adecuados. En algunas espumas de poliuretano, es necesario añadir abridores de celdas para obtener espumas que no se reduzcan al enfriarse. Los aditivos conocidos para inducir la apertura de las celdas incluyen antiespumantes basados en silicona, ceras, sólidos finamente divididos, perfluorocarburos líquidos, aceites de parafina, ácidos grasos de cadena larga y ciertos polioles de poliéter elaborados usando altas concentraciones de óxido de etileno.

Agentes antiestática

50 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden uno o más compuestos antiestática adecuados. Algunas espumas flexibles se utilizan en embalajes, prendas de vestir y otras aplicaciones en las que se desea minimizar la resistencia eléctrica de la espuma para reducir al mínimo la acumulación de cargas estáticas. Esto se ha logrado tradicionalmente con la adición de sales metálicas ionizables, sales de ácido carboxílico, ésteres de fosfato y mezclas de estos. Estos agentes funcionan siendo inherentemente

conductivos o absorbiendo la humedad del aire. El resultado neto deseado es una gran reducción en la resistividad de la superficie de la espuma.

Compatibilizadores

5 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B de la presente invención comprenden uno o más compatibilizadores. Los compatibilizadores son espumas que permiten que dos o más ingredientes no miscibles se unan y proporcionen una fase líquida homogénea. Muchas de dichas moléculas se conocen en la industria de poliuretano, entre ellas: amidas, aminas, aceites hidrocarbonados, ftalatos, polietilenglicoles y ureas.

Composiciones de las mezclas secundarias B específicas

10 En determinadas realizaciones, la presente invención abarca mezclas secundarias B adecuadas para la formación de espumas de poliuretano en donde las mezclas secundarias B comprenden:

100 partes en peso de un componente de polioliol, en donde el componente de polioliol comprende entre aproximadamente 5 por ciento en peso y 100 por ciento en peso de uno o más polioles de policarbonato alifático y en las realizaciones específicas y ejemplos de este documento;

15 0,01 a 20 partes en peso de uno o más agentes de soplado como se describió anteriormente y como se describe en las realizaciones específicas y ejemplos de este documento;

0 a 1 partes en peso de uno o más catalizadores como se describió anteriormente y como se describe en las realizaciones específicas y ejemplos de este documento;

20 0 a 20 partes en peso de una o más moléculas pequeñas reactivas, en donde las moléculas pequeñas reactivas son sustancialmente como se describió anteriormente y como se describe en las realizaciones específicas y ejemplos de este documento; y

0 a 10 partes en peso de uno o más aditivos, en donde los aditivos se seleccionan del grupo que consiste en: compatibilizadores, colorantes, tensioactivos, retardantes de llamas, compuestos antiestática, antimicrobianos, estabilizantes de UV, plastificantes y abridores de celdas, sustancialmente como se describió anteriormente y como se describe en las realizaciones específicas y ejemplos de este documento.

25 En determinadas realizaciones, la presente invención abarca una mezcla secundaria B ilustrada como **PEC-1** en donde el componente de polioliol comprende 5 a 100 en peso de poli(etilencarbonato) polioliol, en donde dicho poli(etilencarbonato) se caracteriza porque tiene un Mn de menos de aproximadamente 7000 g/mol y de más de 99% grupos terminales hidroxilo.

30 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PEC-B1** se caracterizan porque el poli(etilencarbonato) polioliol tiene un Mn de menos de aproximadamente 5.000 g/mol, menos de aproximadamente 4.000 g/mol, menos de aproximadamente 3.000 g/mol, menos de aproximadamente 2.500 g/mol o menos de aproximadamente 2.000 g/mol. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol tiene un Mn entre aproximadamente 500 g/mol y aproximadamente 3.000 g/mol. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol tiene un Mn entre aproximadamente 500g/mol y aproximadamente 2.500 g/mol. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol tiene un Mn entre aproximadamente 500 g/mol y aproximadamente 2.000 g/mol.

35 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PEC-B1** se caracterizan porque el poli(etilencarbonato) polioliol tiene más de 99%, más de 99,5%, más de 99,7%, más de 99,8% o más de aproximadamente 99,9% grupos terminales -OH.

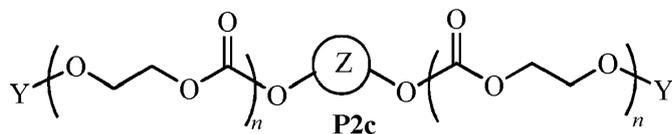
40 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PEC-B1** se caracterizan porque el poli(etilencarbonato) polioliol tiene un índice de polidispersidad (PDI) de menos de aproximadamente 1,8. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol tiene un PDI de menos de aproximadamente 1,5, menos de aproximadamente 1,4, menos de aproximadamente 1,3 o menos de aproximadamente 1,2. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol se caracteriza porque tiene un PDI entre aproximadamente 1,05 y aproximadamente 1,2.

45 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PEC-B1** se caracterizan porque el poli(etilencarbonato) polioliol contiene, en promedio, más de aproximadamente 80% enlaces carbonato. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol contiene, en promedio, más de aproximadamente 85%, más de aproximadamente 90%, más de aproximadamente 92%, más de aproximadamente 95%, más de aproximadamente 97%, más de aproximadamente 98% o más de aproximadamente 99% enlaces carbonato. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol contiene, en promedio, menos de aproximadamente 15% enlaces éter. En determinadas realizaciones, el porcentaje de enlaces carbonato y/o el porcentaje de enlaces éter característicos se definen como exclusivos de cualquier agente de transferencia de cadena incorporado en la cadena de polioliol de policarbonato.

50 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PEC-B1** se caracterizan porque el poli(etilencarbonato) polioliol incluido tiene una viscosidad debajo de 100.000 centipoise a 20 grados Celsius. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol tiene una viscosidad debajo de 15.000 centipoise a 20 grados Celsius.

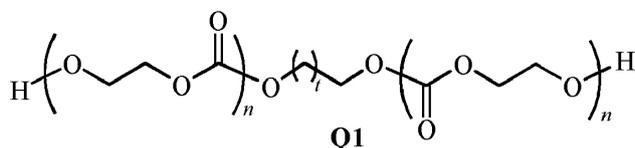
En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) poliol tiene una viscosidad debajo de 10.000 centipoise, debajo de 6.000 centipoise o debajo de 4.000 centipoise, siempre a 20 grados Celsius. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) poliol tiene una viscosidad debajo de 2.000 centipoise a 20 grados Celsius (1 centipoise = 1 mPa·s).

- 5 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PEC-B1** se caracterizan además porque el poli(etilencarbonato) poliol tiene la fórmula **P2c**:



en donde cada -Y es -H, y cada uno de \textcircled{Z} , y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

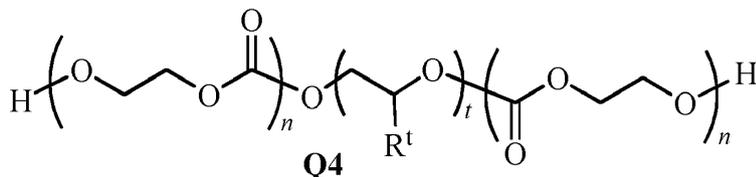
- 10 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PEC-B1** se caracterizan porque el poli(etilencarbonato) poliol tiene la fórmula **Q1**:



en donde t es un número entero entre 1 y 11, y n es como se definió anteriormente y como se define en las realizaciones específicas y ejemplos de este documento.

- 15 En determinadas realizaciones, en donde la composición secundaria B comprende polioles de fórmula **Q1**, t es un número entero entre 1 y 5. En determinadas realizaciones, t es 1. En determinadas realizaciones, t es 2. En determinadas realizaciones, t es 3. En determinadas realizaciones, t es 4. En determinadas realizaciones, t es 5.

En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PEC-B1** se caracterizan porque el poli(etilencarbonato) poliol tiene la fórmula **Q4**:



- 20 en donde R^t es en forma independiente en cada caso -H o $-\text{CH}_3$, y cada uno de n y t es como se definió anteriormente y como se describe en los ejemplos específicos y realizaciones de este documento.

- 25 En determinadas realizaciones, en donde las composiciones secundarias B comprenden polioles de fórmula **Q4**, t es un número entero entre 1 y 3. En determinadas realizaciones, t es 1. En determinadas realizaciones, t es 2. En determinadas realizaciones, t es 3.

En determinadas realizaciones, la presente invención abarca una mezcla secundaria B ilustrada como **PPC-1** que contiene 100 partes en peso de un componente de poliol, en donde el componente de poliol comprende 5 a 100 por ciento en peso de poli(propilencarbonato) poliol, en donde dicho poli(propilencarbonato) se caracteriza porque tiene un M_n de menos de aproximadamente 7000 g/mol y de más de 99% grupos terminales hidroxilo.

- 30 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PPC-B1** se caracterizan porque el poli(propilencarbonato) poliol tiene un M_n de menos de aproximadamente 5.000 g/mol, menos de aproximadamente 4.000 g/mol, menos de aproximadamente 3.000 g/mol, menos de aproximadamente 2.500 g/mol o menos de aproximadamente 2.000 g/mol. En determinadas realizaciones, el poli(propilencarbonato) poliol tiene un M_n entre aproximadamente 500 g/mol y aproximadamente 3.000 g/mol. En determinadas realizaciones, el poli(propilencarbonato) poliol tiene un M_n entre aproximadamente 500g/mol y aproximadamente 2.500 g/mol. En determinadas realizaciones, el poli(propilencarbonato) poliol tiene un M_n entre aproximadamente 500 g/mol y aproximadamente 2.000 g/mol.

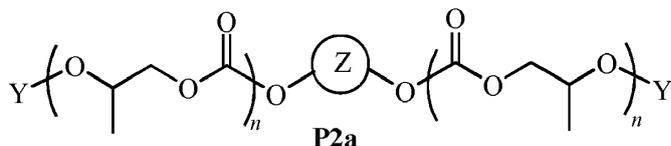
En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PPC-B1** se caracterizan porque el poli(propilencarbonato) polioliol tiene más de 99%, más de 99,5%, más de 99,7%, más de 99,8% o más de aproximadamente 99,9% grupos terminales -OH.

5 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PPC-B1** se caracterizan además porque el poli(propilencarbonato) polioliol tiene un índice de polidispersidad (PDI) de menos de aproximadamente 1,8. En determinadas realizaciones, el poli(propilencarbonato) polioliol tiene un PDI de menos de aproximadamente 1,5, menos de aproximadamente 1,4, menos de aproximadamente 1,3 o menos de aproximadamente 1,2. En determinadas realizaciones, el poli(propilencarbonato) polioliol se caracteriza porque tiene un PDI entre aproximadamente 1,05 y aproximadamente 1,2.

10 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PPC-B1** se caracterizan porque el poli(propilencarbonato) polioliol contiene, en promedio, más de aproximadamente 90% de enlaces carbonato. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol contiene, en promedio, más de aproximadamente 95%, más de aproximadamente 97%, más de aproximadamente 98%, más de aproximadamente 99%, más de aproximadamente 99,5% o más de aproximadamente 99,9%, de enlaces carbonato. En determinadas realizaciones, el poli(propilencarbonato) polioliol no contiene enlaces éter detectables. En determinadas realizaciones, el % de enlaces carbonato y/o el porcentaje de enlaces característicos se definen como exclusivos de cualquier agente de transferencia de cadenas integrado que se pueda integrar en la cadena de polioliol de policarbonato.

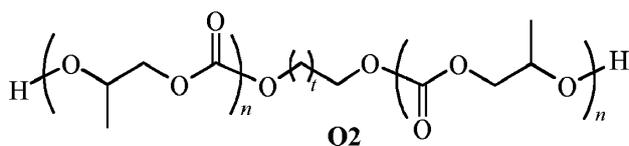
20 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PPC-B1** se caracterizan también porque el poli(propilencarbonato) polioliol incluido tiene una viscosidad inferior a aproximadamente 100.000 centipoise a 20 grados Celsius. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol tiene una viscosidad inferior a 30.000 centipoise, inferior a 15.000 centipoise o inferior a 12.000 centipoise, siempre a 20 grados Celsius. En determinadas realizaciones, el poli(etilencarbonato) polioliol tiene una viscosidad inferior a 10.000 centipoise, 8.000 centipoise o 6.000 centipoise a 20 grados Celsius (1 centipoise = 1 mPa·s).

25 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PPC-B1** se caracterizan además porque el poli(propilencarbonato) polioliol tiene la fórmula **P2a**:



en donde cada -Y es -H, y cada uno de Z y n es como se definió anteriormente y como se describe en las clases y subclases de este documento.

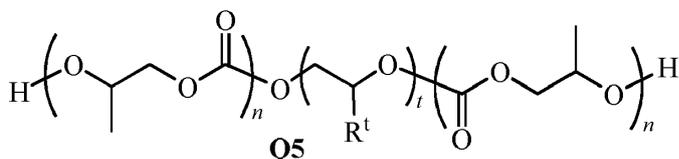
30 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PPC-B1** se caracterizan porque el poli(etilencarbonato) polioliol tiene la fórmula **Q2**:



en donde cada uno de t y n es como se definió anteriormente y como se define en las realizaciones específicas y ejemplos de este documento.

35 En determinadas realizaciones, en donde las composiciones secundarias B comprenden polioles de fórmula **Q2**, t es un número entero entre 1 y 5. En determinadas realizaciones, t es 1. En determinadas realizaciones, t es 2. En determinadas realizaciones, t es 3. En determinadas realizaciones, t es 4. En determinadas realizaciones, t es 5.

En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PPC-B1** se caracterizan porque el poli(etilencarbonato) polioliol tiene la fórmula **Q5**:



40 en donde R^t es en forma independiente en cada caso -H o -CH₃, y cada uno de n y t es como se definió anteriormente y como se describe en los ejemplos específicos y realizaciones de este documento.

En determinadas realizaciones, en donde las composiciones secundarias B comprenden polioles de fórmula **Q5**, t es un número entero entre 1 y 3. En determinadas realizaciones, t es 1. En determinadas realizaciones, t es 2. En determinadas realizaciones, t es 3.

5 En determinadas realizaciones, las mezclas secundarias B **PEC-B1** y **PPC-B1** se caracterizan porque el componente de polioliol de las mezclas contiene entre aproximadamente 5% y 100% del polioliol de policarbonato alifático descrito, en donde el resto (si lo hubiese) comprende uno o más polioles típicamente utilizados para la formulación de espumas de poliuretano.

10 En determinadas realizaciones en las que las mezclas secundarias B **PEC-B1** y **PPC-B1** contienen menos de 100% de polioliol de policarbonato alifático, el resto comprende un polioliol seleccionado del grupo que consiste en polioles de poliéter, polioles de poliéster y combinaciones de estos. En determinadas realizaciones, el resto comprende un polioliol de poliéter. En determinadas realizaciones, el resto comprende un polioliol de poliéster.

IV. Composiciones de espuma

15 En otro aspecto, la presente invención abarca espumas derivadas de una o más composiciones de polioliol de policarbonato alifático descritas anteriormente y en las realizaciones específicas y ejemplos de este documento. En determinadas realizaciones, las composiciones de espuma comprenden el producto de reacción de uno o más poliisocianatos y una mezcla secundaria B que contiene una o más composiciones de polioliol de policarbonato alifático definidas anteriormente.

A. Composiciones de espuma flexibles

20 En un aspecto, la presente invención abarca composiciones de espuma flexibles. En determinadas realizaciones, dichas composiciones de espuma flexibles derivan de una mezcla secundaria B que contiene una o más de las composiciones de polioliol de policarbonato alifático descritas anteriormente y en las realizaciones y ejemplos de este documento.

25 En determinadas realizaciones las composiciones de espuma flexibles comprenden el producto de reacción de una composición secundaria A que comprende isocianatos polifuncionales con una mezcla secundaria B del tipo **PEC-B1**, precedentemente descrito.

En determinadas realizaciones, las composiciones de espuma flexibles comprenden el producto de reacción de una composición secundaria A que comprende isocianatos polifuncionales con una mezcla secundaria B del tipo **PPC-B1**, precedentemente descrito.

30 Las formulaciones secundarias B preferidas para espumas flexibles tienen viscosidades debajo de 100.000 centipoise, preferiblemente debajo de 6.000 centipoise a 20 grados Celsius. Los polioles secundarios B preferidos tienen números OH entre 28 y 112. Los polioles secundarios B preferidos tienen números ácidos debajo de 1. Los polioles secundarios B preferidos tienen funcionalidades entre 1,9 y 3,0. Las formulaciones secundarias A preferidas tienen funcionalidades isocianato debajo de 2,7.

35 Las espumas flexibles terminadas preferidas tienen valores de dureza IFD (*Indentation Force Deflection*) dirigidos a mercados específicos. La fuerza preferida en libras requerida para indentar un indentador redondo de 50 pulgadas cuadradas a 25% en una muestra de espuma de 15" por 15" por 4" es: 6-12 libras para almohadas de cama y respaldos gruesos; 12-18 libras para respaldos gruesos, rellenos de tapicería y fundas; 18-24 libras para respaldos delgados, matrices hiladas, acolchados de asientos muy gruesos y fundas. En algunas realizaciones, las espumas terminadas tienen valores de compresión debajo de 20%, y más preferiblemente debajo de 15%, prefiriéndose más
40 debajo de 10%. Las densidades típicas para espumas moldeadas flexibles terminadas oscilan entre 2 y 3 libras por pie cúbico, y las densidades típicas para espumas flexibles en bloque terminadas oscilan entre 1 y 4 libras por pie cúbico, en donde la mayoría de las aplicaciones están comprendidas entre 1 y 2 libras por pie cúbico (1 libra = 0,45 kg; 1" = 2,54 cm; 1 pie cúbico = 28,3 L).

B. Composiciones de espuma microcelulares

45 En un aspecto, la presente invención abarca composiciones de espuma microcelulares. En determinadas realizaciones, dichas composiciones de espuma microcelulares derivan de una mezcla secundaria B que contiene una o más composiciones de polioliol de policarbonato alifático como se definió anteriormente y se define en las realizaciones y ejemplos de este documento.

50 En determinadas realizaciones, las composiciones de espuma microcelulares comprenden el producto de reacción de una composición secundaria A que comprende isocianatos polifuncionales con una mezcla secundaria B de tipo **PEC-B1**, como se describió anteriormente.

En determinadas realizaciones las composiciones de espuma microcelulares comprenden el producto de reacción de una composición secundaria A que comprende isocianatos polifuncionales con una mezcla secundaria B de tipo **PPC-B1**, como se describió anteriormente.

5 En determinadas realizaciones, las formulaciones secundarias B para espumas microcelulares tienen viscosidades debajo de 100.000 centipoise, preferiblemente debajo de 6.000 centipoise a 20 grados Celsius (1 centipoise = 1 mPa·s). Los polioles secundarios B preferidos tienen números OH entre 28 y 112. Los polioles secundarios B preferidos tienen números ácidos inferiores a 1. Los polioles secundarios B preferidos tienen funcionalidades entre 1,9 y 3,0. Las formulaciones secundarias preferidas A tienen funcionalidades isocianato debajo de 2,7, lo más preferiblemente debajo de 2,0 y 2,5. Las espumas microcelulares terminadas preferidas tienen celdas cerradas y oscilan entre 0,2-0,7 gramos por centímetro cúbico.

C. Composiciones de espuma rígidas

10 En un aspecto, la presente invención abarca composiciones de espuma rígidas. En determinadas realizaciones, dichas composiciones de espuma rígidas derivan de una mezcla secundaria B que contiene una o más de las composiciones de polioliol de policarbonato alifático definidas anteriormente y en las realizaciones y ejemplos de este documento.

15 En determinadas realizaciones, las composiciones de espuma rígidas comprenden el producto de reacción de una composición secundaria A que comprende isocianatos polifuncionales con una mezcla secundaria B de tipo **PEC-B1**, anteriormente descrito.

En determinadas realizaciones, las composiciones de espuma rígida comprenden el producto de reacción de una composición secundaria A que comprende isocianatos polifuncionales con una mezcla secundaria B del tipo **PPC-B1**, anteriormente descrito.

20 En determinadas realizaciones, las formulaciones secundarias B para espumas rígidas tienen viscosidades debajo de 100.000 centipoise, preferiblemente debajo de 40.000 centipoise y lo más preferiblemente debajo de 12.000 centipoise (1 centipoise = 1 mPa·s). Las formulaciones secundarias B preferidas tienen números OH entre aproximadamente 250 y 500. Los polioles secundarios B típicos tienen funcionalidades entre 2 y 8. Las formulaciones secundarias A preferidas tienen funcionalidades isocianato entre 2,3 y 3,5.

25 En algunas realizaciones, las espumas rígidas terminadas tienen valores de alto aislamiento, típicamente expresados como valor "k." Preferiblemente, estos valores k son <0,25 watts/(mK), más preferiblemente valores k de <0,20 watts/(mK), lo más preferiblemente <0,15 watts/(mK). Algunas espumas rígidas preferidas tienen requerimientos de modificación de combustión, como para lograr el desempeño de Inflamabilidad de Clase 1 en la prueba UL 723.

D. Composiciones elastoméricas

30 En otro aspecto, la presente invención abarca elastómeros de poliuretano derivados de una o más composiciones de polioliol de policarbonato alifático descritas anteriormente y en las realizaciones específicas y ejemplos de este documento. En determinadas realizaciones, las composiciones elastoméricas de poliuretano comprenden el producto de reacción de uno o más poliisocianatos y una mezcla secundaria B que contiene una o más composiciones de polioliol de policarbonato alifático anteriormente definidas.

35 En determinadas realizaciones, las formulaciones secundarias B para elastómeros tienen viscosidades inferiores a 100.000 centipoise, preferiblemente inferiores a 6.000 centipoise a 20 grados Celsius (1 centipoise = 1 mPa·s). Los polioles secundarios B preferidos tienen números OH entre 28 y 112. Los polioles secundarios B preferidos tienen números ácidos debajo de 1. Los polioles secundarios B preferidos tienen funcionalidades entre 1,9 y 3,0. Las formulaciones secundarias A preferidas tienen funcionalidades isocianato debajo de 2,7.

40 E. Composiciones termoplásticas

En otro aspecto, la presente descripción abarca composiciones termoplásticas derivadas de una o más composiciones termoplásticas de las composiciones de polioliol de policarbonato alifático anteriormente descritas.

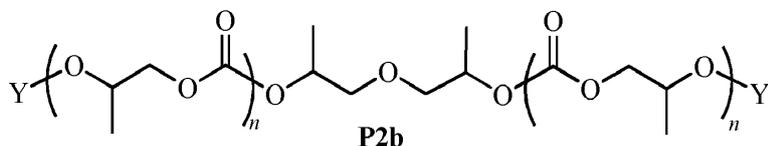
45 En determinadas realizaciones, las formulaciones secundarias B para elastómeros termoplásticos tienen viscosidades inferiores a 1.000.000 centipoise, preferiblemente inferiores a 6.000 centipoise a 20 grados Celsius (1 centipoise = 1 mPa·s). Los polioles secundarios B preferidos tienen números OH entre 28 y 112. Los polioles secundarios B preferidos tienen números ácidos debajo de 1. Los polioles secundarios preferidos B tienen funcionalidades entre 1,9 y 2,1. Las formulaciones secundarias A preferidas tienen funcionalidades isocianato entre 1,9 y 2,1.

Ejemplos

50 La presente invención se ilustra mediante los siguientes ejemplos.

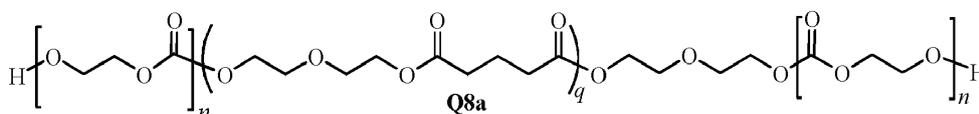
A continuación se presentan formulaciones de una diversidad de espumas y elastómeros de poliuretano. Estos materiales se prepararon usando los polioles de policarbonato alifático definidos anteriormente en este documento. Concretamente, los polioles de policarbonato alifático utilizados e identificados en los ejemplos que siguen tienen las siguientes propiedades:

NOV-61-151 es un poli(propilencarbonato) polioli iniciado con dipropilenglicol y tiene un Mn de 807 g/mol, un PDI de 1,276, más de 99% grupos terminales -OH, más de 99% enlaces carbonato (exclusivos del enlace éter en el dipropilenglicol). Este polioli se ajusta a la fórmula **P2B**:



5 en donde cada -Y es -H, y n es en promedio en la composición aproximadamente 3,3.

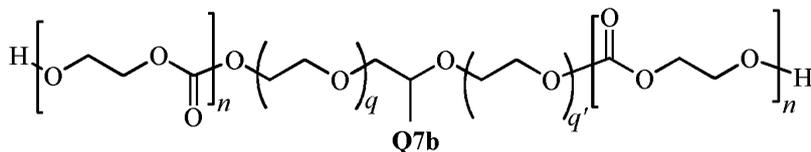
NOV-53-047 es un poli(etilencarbonato) polioli iniciado con Fomrez® 11-112, un polioli de poliéster comercialmente disponible (~1,000 g/mol poli(dietilenglicol adipato)). El polioli PEC tiene un Mn de 1748 g/mol, un PDI de 1,76, contiene más de 99% grupos terminales -OH y aproximadamente 85% enlaces carbonato (excluyendo el iniciador). Este material se ajusta a la fórmula **Q8a**:



10 en donde q es, en promedio en la composición, aproximadamente 4,4, y n es, en promedio en la composición, aproximadamente 4,3.

15 **NOV-53-053** es un poli(etilencarbonato) polioli iniciado con Fomrez® 11-112 y que tiene un Mn de 2486 g/mol, un PDI de 1,41, que contiene más de 99% grupos terminales -OH y tiene aproximadamente 85% enlaces carbonato (excluido el iniciador). Este material se ajusta a la fórmula **Q8a**, en donde q es, en promedio en la composición, aproximadamente 4,4, y n es, en promedio en la composición, aproximadamente 8,4.

20 **NOV-53-050** es un poli(etilencarbonato) polioli iniciado con Voranol® 220-110N, un polioli de poliéter (óxido de polipropileno cubierto con óxido de polietileno ~1.000 g/mol). El polioli tiene un Mn de 2656 g/mol, un PDI de 1,10, contiene más de 99% grupos terminales -OH y aproximadamente 85% enlaces carbonato (excluido el iniciador). Este material se ajusta a la fórmula **Q7b**:



en donde q y q' son, en promedio en la composición, aproximadamente 8, y n es, en promedio en la composición, aproximadamente 5,3.

25 **NOV-53-052** es un poli(etilencarbonato) polioli iniciado con Voranol® 220-110N y tiene un Mn de 1938 g/mol, un PDI de 1,11, que contiene más de 99% grupos terminales -OH y aproximadamente 85% de enlaces carbonato (excluido el iniciador). Este material se ajusta a la fórmula **Q7b**, en donde q y q' son, en promedio en la composición, aproximadamente 8, y n es, en promedio en la composición, aproximadamente 9,4.

Ejemplo 1. Formulaciones de espuma flexible (comparativo)

30 En el Ejemplo 1, se formuló una serie de espumas de poliuretano flexibles y se completó una evaluación cualitativa de su desempeño. En todos los casos, el procedimiento para preparar estas espumas es el siguiente. Primero, todos los componentes secundarios B se dispensaron en cantidades precisas en una taza, incluidos todos los polioles, catalizadores y otros aditivos, y agua como agente de soplado. Luego se mezcló a mano usando una herramienta de agitación de madera a temperatura ambiente por un mínimo de 30 segundos, hasta que la mezcla se tornó totalmente uniforme. Después de que la mezcla secundaria B se tornó uniforme, se añadió la mezcla secundaria A y la mezcla se mezcló nuevamente por un mínimo de 15 segundos. Una vez que toda la formulación estaba bien mezclada, la mezcla se transfirió a una nueva taza y se dejó elevar. Se añadieron luego las espumas para curar a temperatura ambiente. En las tablas que siguen, "Tiempo hasta cremar" se refiere al tiempo transcurrido después de añadir la composición secundaria A para completar la mezcla, hasta que la mezcla comenzó a burbujear, según lo indicado por la opacidad de la mezcla. "Tiempo hasta gelificar" es la cantidad de tiempo después de añadir la composición secundaria A hasta que comenzó a formarse la red de espuma de poliuretano, según lo indicado presionando la espuma con la herramienta de mezclado. "Tiempo hasta subir" es la cantidad de tiempo después de añadir la composición secundaria A hasta que la espuma completó su elevación completa.

Ejemplo de espuma flexible 1B		
Componente	Descripción	Gramos
Mondur MRS	MDI polimérico rico en isómero 2,4-MDI, 2,6 funcional	38,95
Nov 53-052	Poliol FEC, 1940 Pm, 1,1 FDI, funcionalidad 2,0	58,95
agua	Agua como agente de soplado	2,28
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestaño dilaurato	0,09
Dabco 33LV	Catalizador de soplado, 33% Trietilendiamina en 87% dipropilenglicol	0,18
DC 5180	Tensioactivo de silicio, uso como espuma de poliuretano general	0,57
Resultados		
45	Tiempo hasta cremar	
2:30	Tiempo hasta gelificar	
2:50	Tiempo hasta subir	
La espuma reacciona y se eleva bien, cierta reducción 1 hora, mucha reducción toda la noche		

Ejemplo de espuma flexible 1A		
Componente	Descripción	Gramos
Mondur MRS	MDI polimérico rico en isómero 2,4-MDI, 2,6 funcional	40,85
Nov 53-052	Poliol FEC, 1940 Pm, 1,1 FDI, 2,0 funcional	56,95
agua	Agua como agente de soplado	2,28
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestaño dilaurato	0,09
Dabco 33LV	Catalizador de soplado, 33% trietilendiamina en 87% dipropilenglicol	0,18
DC 5180	Tensioactivo de silicio, uso como espuma de poliuretano general	0,57
Resultados		
55	Tiempo hasta cremar	
2:40	Tiempo hasta gelificar	
3:20	Tiempo hasta subir	
La espuma reacciona y se eleva bien, cierta reducción 1 hora, mucha reducción encogimiento toda la noche		

Ejemplo de espuma flexible 1D			
Componente	Descripción	Gramos	
Mondur MRS	MDI polimérico rico en isómero 2,4'-MDI, funcionalidad 2,6	38,25	
PEC	3500 Pm PEC, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	20,40	
Nov 53-053	Poliol PEC, 2500 Pm, 1,4 PDI, funcionalidad 2,0	28,48	
agua	Agua como agente de soplado	2,28	
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,09	
Dabco 33LV	Catalizador de soplado, 33% trietilendiamina en dipropilenglicol	67% 0,16	
DC 5160	Tensioactivo de silicio, uso como espuma de poliuretano general	0,57	
Resultados			
40	Tiempo hasta cremar		
2:02	Tiempo hasta gelificar		
0:00	Tiempo hasta subir		
La espuma luce bien, sin reducción, probablemente esté demasiado rígida como para reducirse			

Ejemplo de espuma flexible 1C			
Componente	Descripción	Gramos	
Mondur MRS	MDI polimérico rico en isómero 2,4'-MDI, funcionalidad 2,6	38,40	
Nov 53-050	Poliol PEC, 2660 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	56,95	
agua	Agua como agente de soplado	2,28	
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,09	
Dabco 33LV	Catalizador de soplado, 33% Trietilendiamina in dipropilenglicol	67% 0,16	
DC 5160	Tensioactivo de silicio, uso como espuma de poliuretano general	0,57	
Resultados			
35	Tiempo hasta cremar		
2:09	Tiempo hasta gelificar		
2:35	Tiempo hasta subir		
La espuma reacciona y se eleva bien, cierta reducción 1 hora, mucha reducción toda la noche			

Ejemplo 2. Formulaciones de espuma microcelulares (de acuerdo con la invención)

En el Ejemplo 2, se formuló una serie de espumas de poliuretano microcelulares y se completó una evaluación cualitativa de su desempeño. El procedimiento para elaborar estas espumas es el siguiente. Primero, todos los componentes secundarios B se dispensaron en cantidades precisas en una taza, incluidos todos los polioles, catalizadores y otros aditivos, y agua como agente de soplado. La mayoría de las muestras se mezclaron luego a mano usando una herramienta de agitación de madera a temperatura ambiente durante un mínimo de 30 segundos, hasta que la mezcla estuvo completamente uniforme. Para las muestras más grandes 2L, 2M y 2N, se usó una mezcladora mecánica a 1.100 RPM para completar el mezclado de los componentes secundarios B. Después de que la mezcla secundaria B se tornó uniforme, se añadió la mezcla secundaria A y la mezcla se mezcló nuevamente por un mínimo de 15 segundos, a mano en la mayoría de los casos y utilizando la mezcladora mecánica a 1.100 RPM para muestras de 2L, 2M y 2N. Después de mezclar totalmente la formulación, la mezcla se vertió en una taza o, en los casos de 2L, 2M y 2N, en un molde de aluminio. Las espumas luego se dejaron curar a temperatura ambiente. En las tablas que siguen, "Tiempo hasta cremar" se refiere al tiempo transcurrido después de que se añadió la composición secundaria A para completar la mezcla hasta que la mezcla comenzó a burbujear, según lo indicado por la opacidad de la mezcla. "Tiempo hasta gelificar" es la cantidad de tiempo después de que se añadió la composición secundaria A hasta que comenzó a formarse la red de espuma de poliuretano, según lo indicado al presionar la espuma con la herramienta de mezclado. "Tiempo hasta subir" es la cantidad de tiempo después de que se añadió la composición secundaria A hasta que la espuma subió por completo.

Ejemplo de espuma microcelular 2B		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolimero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	29,64
Nov-53-047	Polioli PEC, 1750 Pm, 1,76 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,12
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,04
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,03
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,40
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
29	Tiempo hasta cremar	
0	Tiempo hasta gelificar	
2:00	Tiempo hasta subir	
La espuma se eleva bien, vuelve a reducirse en menos de 1 hora, 50% toda la noche, con grietas en la espuma.		

Ejemplo de espuma microcelular 2A		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolimero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	29,64
Nov-53-047	Polioli PEC, 1750 Pm, 1,76 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,12
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,04
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,04
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,40
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
39	Tiempo hasta cremar	
0	Tiempo hasta gelificar	
3:00	Tiempo hasta subir	
La espuma se eleva bien, vuelve a reducirse en menos de 1 hora, 50% reducción toda la noche.		

Ejemplo de espuma microcelular 2D		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolimero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	26,50
Nov-53-053	Poliol PEC, 2500 Pm, 1,4 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,12
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,08
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,04
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,00
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,40
Resultados		
39	Tiempo hasta cremar	
1:23	Tiempo hasta gelificar	
2:10	Tiempo hasta subir	
La espuma se eleva bien, se reduce 50% durante la noche		

Ejemplo de espuma microcelular 2C		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolimero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	26,50
Nov-53-053	Poliol PEC, 2500 Pm, 1,4 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,12
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,04
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,04
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,00
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,40
Resultados		
39	Tiempo hasta cremar	
1:28	Tiempo hasta gelificar	
2:20	Tiempo hasta subir	
La espuma se eleva bien, exhibe reducción al cabo de una hora, vuelve a reducirse 50% durante la noche		

Ejemplo de espuma microcelular 2E		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolímero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	16,00
Mondur MRS	MDI polimérico rico en isómero 2,4'-MDI, funcionalidad 2,6	6,50
Nov-53-053	Polioli PEC, 2500 Pm, 1,4 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,12
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,04
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,04
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,00
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,40
Resultados		
36	Tiempo hasta cremar	
1:22	Tiempo hasta gelificar	
2:00	Tiempo hasta subir	
	La espuma luce bien, se reduce 30% durante la noche	

Ejemplo de espuma microcelular 2F		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolímero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	25,69
Nov-53-050	Polioli PEC, 2660 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,12
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,04
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,04
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,00
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,40
Resultados		
38	Tiempo hasta cremar	
0	Tiempo hasta gelificar	
1-35	Tiempo hasta subir, la espuma luce bien, se reduce aproximadamente 20% durante la noche	

Ejemplo de espuma microcelular 2G		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolímero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	28,86
Nov-53-052	Polioli PEC, 1940 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,12
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestaño dilaurato	0,04
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,04
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,00
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,40
Resultados		
36	Tiempo hasta cremar	
1:08	Tiempo hasta gelificar	
1:40	Tiempo hasta subir	
La espuma se eleva bien, se reduce 30-40% durante la noche, suave y grumosa.		

Ejemplo de espuma microcelular 2H		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolímero MDI c/polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	17,86
MM103	MDI modificado, funcionalidad 2,15	7,15
Nov-53-052	Polioli PEC, 1940 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,12
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestaño dilaurato	0,04
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,04
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,40
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
40	Tiempo hasta cremar	
1:08	Tiempo hasta gelificar	
1:35	Tiempo hasta subir	
La espuma luce bien, pero se reduce 30-40% durante la noche		

Ejemplo de espuma microcelular 2J		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolimero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	0,00
MM103	MDI modificado, funcionalidad 2,15	19,05
Nov-53-053	Polioli PEC, 2500 Pm, 1,4 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,24
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,04
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,04
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,40
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
36	Tiempo hasta cremar	
53	Tiempo hasta gelificar	
1:20	Tiempo hasta subir	
La espuma luce bien pero todavía pegajosa después de 10 min. Se reduce 10% durante la noche		

Ejemplo de espuma microcelular 2I		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolimero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	0,00
MM103	MDI modificado, funcionalidad 2,15	17,14
Nov-53-053	Polioli PEC, 2500 Pm, 1,4 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,12
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,04
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,04
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,40
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
36	Tiempo hasta cremar	
52	Tiempo hasta gelificar	
1:15	Tiempo hasta subir	
Reacciona rápido, difícil de verter después de mezclar. Se reduce 10% durante la noche		

Ejemplo de espuma microcelular 2L		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolimero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	87,53
MM103	MDI modificado, funcionalidad 2,15	10,50
Nov-53-050	Polioli PEC, 2660 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2.0	150,00
agua	Agua como agente de soplado	0,75
EG	Etilenglicol	7,50
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestaño dilaurato	0,08
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,15
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	1,65
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
0	Tiempo hasta cremar	
0	Tiempo hasta gelificar	
0:00	Tiempo hasta subir	
Se vierte en el molde de la placa. La placa luce bien, se observa <10% de reducción al desmoldar		

Ejemplo de espuma microcelular 2K		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolimero MDI c/polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	24,33
MM103	MDI modificado, funcionalidad 2,15	2,80
Nov-53-050	Polioli PEC, 2660 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	40,00
agua	Agua como agente de soplado	0,24
EG	Etilenglicol	2,00
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestaño dilaurato	0,04
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,04
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,40
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
43	Tiempo hasta cremar	
1:07	Tiempo hasta gelificar	
2:10	Tiempo hasta subir	
La espuma luce bien, se reduce <10% durante la noche		

Ejemplo de espuma microcelular 2N		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolimero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	0,00
MM103	MDI modificado, funcionalidad 2,15	69,02
Nov-53-053	Polioli PEC, 2500 Pm, 1,4 PDI, funcionalidad 2,0	150,00
agua	Agua como agente de soplado	0,75
EG	Etilenglicol	7,50
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,05
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,10
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	1,65
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
0	Tiempo hasta cremar	
0	Tiempo hasta gelificar	
0:00	Tiempo hasta subir	
Se vierte en el molde de la placa. La reacción fue demasiado rápida, el material no se elevó por todo el espesor del molde.		

Ejemplo de espuma microcelular 2M		
Componente	Descripción	Gramos
Suprasec 9612	Prepolimero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,01	99,38
MM103	MDI modificado, funcionalidad 2,15	10,50
Nov-53-052	Polioli PEC, 1940 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	150,00
agua	Agua como agente de soplado	0,75
EG	Etilenglicol	7,50
BD	Butanodiol	0,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,08
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,15
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,00
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	1,65
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
0	Tiempo hasta cremar	
0	Tiempo hasta gelificar	
0:00	Tiempo hasta subir	
Se vierte en el molde de la placa. La placa luce bien, se observa una reducción <10% al desmoldar		

Ejemplo 3. Formulaciones de espuma rígidas (comparativo)

5 En el Ejemplo 3, se formuló una serie de espumas de poliuretano rígidas y se realizó una evaluación cualitativa de su desempeño. En todos los casos, el procedimiento para preparar estas espumas es el siguiente. Primero, se dispensaron todos los componentes secundarios B en cantidades precisas en una taza, incluidos todos los polioles, catalizadores y otros aditivos, y agua como agente de soplado. Luego se mezclaron a mano usando una herramienta de agitación de madera a temperatura ambiente por un mínimo de 30 segundos, hasta que la mezcla se tornó completamente uniforme. Después de que la composición secundaria B se tornó uniforme, se añadió la composición secundaria A y la mezcla se mezcló nuevamente a mano por un mínimo de 15 segundos. Después de mezclar bien toda la formulación, la mezcla se transfirió a una nueva taza y se dejó elevar. Las espumas luego se dejaron curar a temperatura ambiente. En las tablas que siguen, "Tiempo hasta curar" se refiere al tiempo transcurrido después de añadir la composición secundaria A para completar la mezcla, hasta que la mezcla comenzó a burbujear, según lo indicado por la opacidad de la mezcla. "Tiempo hasta gelificar" es la cantidad de tiempo después de añadir la composición secundaria A hasta que comenzó a formarse la red de espuma de poliuretano, según lo indicado presionando la espuma con la herramienta de mezclado. "Tiempo hasta subir" es la cantidad de tiempo después de añadir la composición secundaria A hasta que la espuma completa su elevación completa.

10

15

Ejemplo de espuma rígida 3A			
Componente	Descripción	Gramos	
Mondur 489	MDI polimérico, funcionalidad 3,0	25,10	
Nov-53-052	Poliol PEC, 1940 Pm, 1.1 PDI, funcionalidad 2,0	30,00	
agua	Agua como agente de soplado	1,14	
Dabco BL11	Catalizador de soplado, 70% bis(2-dimetilamino-etil) éter en 30% dipropilenglicol	0,39	
Dabco 33LV	Catalizador de soplado, 33% Trietilendiamina en 67% dipropilenglicol	0,15	
DC5160	Tensioactivo de silicona, uso como espuma de poliuretano general	0,36	
Resultados			
1:00	Tiempo hasta cremar		
2:27	Tiempo hasta gelificar		
	Las espumas se reducen durante la noche		

Ejemplo de espuma rígida 3B			
Componente	Descripción	Gramos	
Mondur 489	MDI polimérico, funcionalidad 3,0	23,55	
Nov-53-050	Poliol PEC, 2660 Pm, 1.1 PDI, funcionalidad 2,0	30,00	
agua	Agua como agente de soplado	1,14	
Dabco BL11	Catalizador de soplado, 70% bis(2-dimetilamino-etil) éter en 30% dipropilenglicol	0,39	
Dabco 33LV	Catalizador de soplado, 33% Trietilendiamina en 67% dipropilenglicol	0,15	
DC5160	Tensioactivo de silicona, uso como espuma de poliuretano general	0,36	
Resultados			
1:00	Tiempo hasta cremar		
<2:00	Tiempo hasta gelificar		
	La espuma luce bien, se reduce durante la noche		

Ejemplo de espuma rígida 3D		
Componente	Descripción	Gramos
Mondur 489	MDI polimérico, funcionalidad 3,0	30,76
Nov-61-151	Poliol PPC, 800 Pm, 1,3 PDI, funcionalidad 2,0	30,00
agua	Agua como agente de soplado	1,20
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,45
Dabco 33LV	Catalizador de soplado, 33% Trietilendiamina en dipropilenglicol	0,15
DC5169	Tensioactivo de silicona, uso como espuma de poliuretano general	0,36
Resultados		
0:00	Tiempo hasta cremar	
0:00	Tiempo hasta gelificar	
	La espuma comienza a subir, luego ebulliciona y colapsa	

Ejemplo de espuma rígida 3C		
Componente	Descripción	Gramos
Mondur 489	MDI polimérico, funcionalidad 3,0	23,90
Nov-53-053	Poliol PEC, 2500 Pm, 1,4 PDI, funcionalidad 2,0	30,00
agua	Agua como agente de soplado	1,14
Dabco BL11	Catalizador de soplado, 70% bis(2-dimetilamino-etil) éter en 30% dipropilenglicol	0,39
Dabco 33LV	Catalizador de soplado, 33% trietilendiamina en 67% dipropilenglicol	0,15
DC5160	Tensioactivo de silicona, uso como espuma de poliuretano general	0,36
Resultados		
1:15	Tiempo hasta cremar	
0:00	Tiempo hasta gelificar	
	La espuma ebulliciona, colapsa, como una red pero no desarrolla fuerza hasta mucho tiempo después del soplado	

Ejemplo de espuma rígida 3F		
Componente	Descripción	Gramos
Mondur 489	MDI polimérico, funcionalidad 3,0	30,76
Nov-53-050	Poliol PEC, 2660 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	5,00
Nov-61-151	Poliol PPC, 800 Pm, 1,3 PDI, funcionalidad 2,0	30,00
agua	Agua como agente de soplado	1,20
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,45
Dabco 33LV	Catalizador de soplado, 33% trietilendiamina en dipropilenglicol	0,15
DC5160	Tensioactivo de silicona, uso como espuma de poliuretano general	0,36
Resultados		
0:00	Tiempo hasta cremar	
<1:40	Tiempo hasta gelificar	
	La espuma sube sin reducirse. Las celdas son gruesas, la espuma es friable	

Ejemplo de espuma rígida 3E		
Componente	Descripción	Gramos
Mondur 489	MDI polimérico, funcionalidad 3,0	30,76
Nov-61-151	Poliol PPC, 800 Pm, 1,3 PDI, funcionalidad 2,0	30,00
agua	Agua como agente de soplado	1,20
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,45
Dabco 33LV	Catalizador de soplado, 33% trietilendiamina en dipropilenglicol	0,15
DC5160	Tensioactivo de silicona, uso como espuma de poliuretano general	0,36
Resultados		
0:00	Tiempo hasta cremar	
0:00	Tiempo hasta gelificar	
	La espuma sube sin reducirse. Las celdas son gruesas, la espuma es friable	

Ejemplo 4. Formulaciones elastoméricas (según la invención)

5 En el Ejemplo 4, se formuló una serie de elastómeros y se efectuó una evaluación cualitativa de su desempeño de la siguiente manera. Primero, todos los componentes secundarios B se dispensaron en cantidades precisas en una taza, incluidos todos los polioles, catalizadores y otros aditivos. Luego se mezclaron a mano usando una herramienta de agitación de madera a temperatura ambiente por un mínimo de 30 segundos, hasta que la mezcla se tornó totalmente uniforme. Después de añadir los componentes secundarios B, se añadieron los componentes secundarios A, y la mezcla se volvió a mezclar a mano durante un mínimo de 15 segundos. Después de mezclar bien toda la formulación, la mezcla se vertió en un molde de aluminio y se curó a 65 grados Celsius por una hora.

Ejemplo de elastómero 4B			
Componente	Descripción	Gramos	
Vibrathane 8000	Prepolímero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,0	36,40	
Nov-53-053	Polioli PEC, 2500 Pm, 1,4 PDI, funcionalidad 2,0	50,00	
agua	Agua como agente de soplado	0,00	
EG	Etilenglicol	0,00	
BD	Butanodiol	4,00	
T12	Catalizador de gelificación, dibutyltetaño dilaurato	0,05	
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,00	
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,03	
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,00	
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00	
Resultados			
Reacciona bien. Después de curar durante toda la noche, el elastómero es débil, se puede estirar al 100%			

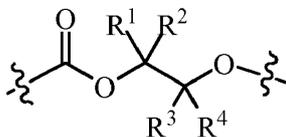
Ejemplo de elastómero 4A			
Componente	Descripción	Gramos	
Vibrathane 8000	Prepolímero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,0	35,20	
Nov-53-050	Polioli PEC, 2660 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	50,00	
agua	Agua como agente de soplado	0,00	
EG	Etilenglicol	0,00	
BD	Butanodiol	4,00	
T12	Catalizador de gelificación, dibutyltetaño dilaurato	0,05	
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,00	
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,03	
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,00	
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00	
Resultados			
Reacciona bien. Después de curar durante toda la noche, el elastómero es débil, se puede estirar al 100%			

Ejemplo de elastómero 4D		
Componente	Descripción	Gramos
Vibrathane 8000	Polímero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,0	39,80
Nov-53-052	Polioli PEC, 1940 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	50,00
agua	Agua como agente de soplado	0,00
EG	Etilenglicol	0,00
BD	Butanodiol	4,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,11
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,00
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,04
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,00
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
reacciona muy lentamente, no se puede desmoldar después de 1 hora, se deja toda la noche; la muestra de elastómero es frágil, poca fuerza; Después de curar por 2 meses a TA, el elastómero parece más fuerte, se puede estirar al 100%		

Ejemplo de elastómero 4C		
Componente	Descripción	Gramos
Vibrathane 8000	Prepolímero MDI c/ polioli de poliéster, funcionalidad 2,0	39,80
Nov-53-052	Polioli PEC, 1940 Pm, 1,1 PDI, funcionalidad 2,0	50,00
agua	Agua como agente de soplado	0,00
EG	Etilenglicol	0,00
BD	Butanodiol	4,00
T12	Catalizador de gelificación, dibutilestano dilaurato	0,05
Dabco 1027	Catalizador de soplado, amina terciaria en 30% etilenglicol	0,00
Dabco 1028	Catalizador de soplado, catalizador de amina terciaria en butanodiol	0,03
DC193	Tensioactivo de silicona, utilizado principalmente en suelas de calzado	0,00
DC3043	Tensioactivo de silicona, utilizado para espuma microcelular	0,00
Resultados		
Reacciona muy lentamente, no se puede desmoldar después de 1 hora, se deja toda la noche; la muestra de elastómero es frágil, poca fuerza; Después de curar a TA por 2 meses, el elastómero parece más fuerte, se puede estirar al 100%		

REIVINDICACIONES

1. Una mezcla secundaria B para la formulación de composiciones de espuma microcelular o para la formulación de composiciones elastoméricas, en donde la mezcla comprende un polioli de policarbonato alifático que tiene una unidad de repetición primaria con una estructura:

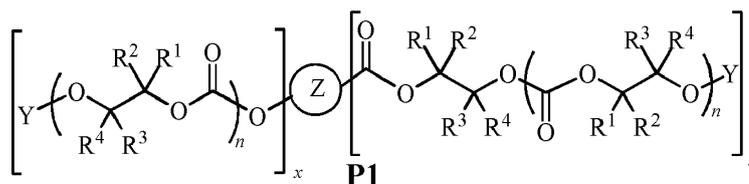


5 en donde R¹, R², R³ y R⁴ se seleccionan en forma independiente, en cada caso en la cadena polimérica, del grupo que consiste en -H, flúor, un grupo alifático C₁₋₄₀ opcionalmente sustituido, un grupo heteroalifático C₁₋₂₀ opcionalmente sustituido y un grupo arilo opcionalmente sustituido, en donde cualquiera de dos o más de R¹, R², R³ y R⁴ opcionalmente se puede tomar junto con los átomos intervinientes para formar uno o más anillos

10 opcionalmente sustituidos que opcionalmente contienen uno o más heteroátomos, en donde la mezcla comprende además uno o más polioles adicionales seleccionados del grupo que consiste en polioles de poliéter, polioles de poliéter y mezclas de estos,

en donde el polioli de policarbonato alifático se caracteriza porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 85% o más,

15 en donde el polioli de policarbonato alifático tiene una estructura P1:



20 en donde R¹, R², R³ y R⁴ se seleccionan en forma independiente, en cada caso en la cadena polimérica, del grupo que consiste en -H, flúor, un grupo alifático C₁₋₃₀ opcionalmente sustituido, y un grupo heteroalifático C₁₋₂₀ opcionalmente sustituido, y un grupo arilo C₆₋₁₀ opcionalmente sustituido, en donde cualquiera de dos o más de R¹, R², R³ y R⁴ puede opcionalmente tomarse junto con los átomos intervinientes para formar uno o más anillos opcionalmente sustituidos, que opcionalmente contienen uno o más heteroátomos; Y es, en cada caso en forma independiente, -H o el sitio de sujeción a cualquiera de los restos de extensión de cadenas descritos en las clases y subclases de este documento;

n es en cada caso, en forma independiente, un número entero entre 3 y 1.000;

25 Z es un resto multivalente; y

x e y son cada uno en forma independiente un número entero entre 0 y 6, en donde la suma de x e y está comprendida entre 2 y 6,

en donde Z deriva de un agente de transferencia de cadena polifuncional que tiene dos o más sitios desde los cuales puede ocurrir la copolimerización epóxido/CO₂.

30 2. La mezcla secundaria B según la reivindicación 1, en donde (A) el polioli de policarbonato alifático deriva de la copolimerización de dióxido de carbono y uno o más epóxidos, o: donde (B) el polioli de policarbonato alifático comprende un copolímero de dióxido de carbono y óxido de etileno, o:

en donde (C) el polioli de policarbonato alifático comprende un copolímero de dióxido de carbono y óxido de propileno.

35 3. La mezcla secundaria B según la reivindicación 1, en donde el polioli de policarbonato alifático se caracteriza porque al menos 90% de los grupos terminales son grupos -OH, o:

en donde el polioli de policarbonato alifático se caracteriza porque al menos 95%, al menos 96%, al menos 97% o al menos 98% de los grupos terminales son grupos -OH.

4. La mezcla secundaria B según la reivindicación 3, en donde el polioli de policarbonato alifático se caracteriza porque al menos 99%, al menos 99,5%, al menos 99,7% o al menos 99,8% de los grupos terminales son grupos -OH, o:

5 en donde el polioli de policarbonato alifático se caracteriza porque al menos 99,9% de los grupos terminales son grupos -OH.

10 5. La mezcla secundaria B según la reivindicación 1, en donde el polioli de policarbonato alifático comprende un terpolímero de dióxido de carbono y óxido de etileno junto con uno o más epóxidos adicionales seleccionados del grupo que consiste en óxido de propileno, óxido de 1,2-buteno, óxido de 2,3-buteno, óxido de ciclohexeno, óxido de 3-vinil ciclohexeno, epiclorohidrina, ésteres de glicidilo, éteres de glicidilo, óxidos de estireno y epóxidos de alfaolefinas superiores, preferiblemente:

en donde los terpolímeros contienen una mayoría de unidades de repetición de óxido de etileno con cantidades menores de unidades de repetición derivadas de uno o más epóxidos adicionales, además preferiblemente:

en donde los terpolímeros contienen 50% a 99,5% unidades de repetición derivadas de óxido de etileno.

15 6. La mezcla secundaria B según la reivindicación 1, en donde el polioli de policarbonato alifático comprende un terpolímero de dióxido de carbono y óxido de propileno junto con uno o más epóxidos adicionales seleccionados del grupo que consiste en óxido de etileno, óxido de 1,2-buteno, óxido de 2,3-buteno, óxido de ciclohexeno, óxido de 3-vinil ciclohexeno, epiclorohidrina, ésteres de glicidilo, éteres de glicidilo, óxidos de estireno y epóxidos de alfaolefinas superiores, preferiblemente;

en donde los terpolímeros contienen 50% a 99,5% unidades de repetición derivadas de óxido de etileno.

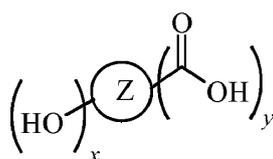
20 7. La mezcla secundaria B según la reivindicación 1, en donde el polioli de policarbonato alifático se caracteriza porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 90% o más, o:

en donde el polioli de policarbonato alifático se caracteriza porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 95% o más, o:

25 en donde el polioli de policarbonato alifático se caracteriza porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 98% o más, o:

en donde el polioli de policarbonato alifático se caracteriza porque, en promedio en la composición, el porcentaje de enlaces carbonato es 99% o más.

8. La mezcla secundaria B según la reivindicación 1, en donde \textcircled{Z} deriva de un agente de transferencia de cadena polifuncional que tiene una fórmula:



30

9. La mezcla secundaria B según la reivindicación 1 en donde (A) \textcircled{Z} deriva de un alcohol dihídrico, o:
en donde (B) y es 0 y x es mayor que 2.

10. La mezcla secundaria B según la reivindicación 9, en donde el alcohol dihídrico comprende un diol C₂₋₄₀, o:

35 en donde el alcohol dihídrico se selecciona del grupo que consiste en: 1,2-etanodiol, 1,2-propanodiol, 1,3-propanodiol, 1,2-butanodiol, 1,3-butanodiol, 1,4-butanodiol, 1,5-pentanodiol, 2,2-dimetilpropano-1,3-diol, 2-butil-2-etilpropano-1,3-diol, 2-metil-2,4-pentano diol, 2-etil-1,3-hexano diol, 2-metil-1,3-propano diol, 1,5-hexanodiol, 1,6-hexanodiol, 1,8-octanodiol, 1,10-decanodiol, 1,12-dodecanodiol, 2,2,4,4-tetrametilciclobutano-1,3-diol, 1,3-ciclopentanodiol, 1,2-ciclohexanodiol, 1,3-ciclohexanodiol, 1,4-ciclohexanodiol, 1,2-ciclohexanodimetanol, 1,3-ciclohexanodimetanol, 1,4-ciclohexanodimetanol, 1,4-ciclohexanodietanol, isosorbida, glicerol monoésteres, glicerol monoéteres, trimetilolpropano monoésteres, trimetilolpropano monoéteres, pentaeritritol diésteres, pentaeritritol diéteres y derivados alcoxilados de cualquiera de estos, o:

40

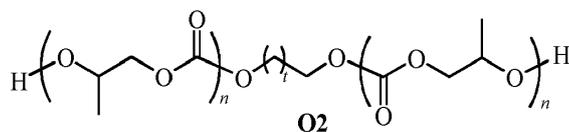
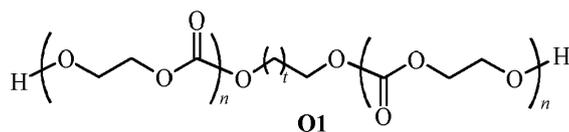
en donde el alcohol dihídrico se selecciona del grupo que consiste en: dietilenglicol, trietilenglicol, tetraetilenglicol, poli(etilenglicol) superior, como aquellos que tienen pesos moleculares promedio en número de 220 a 2000 g/mol, dipropilenglicol, tripropilenglicol y poli(propilenglicoles) superiores, o:

en donde el alcohol dihídrico comprende un derivado alcoxilado de un compuesto seleccionado del grupo que consiste en: un diácido, un diol y un hidroxiaácido, o:

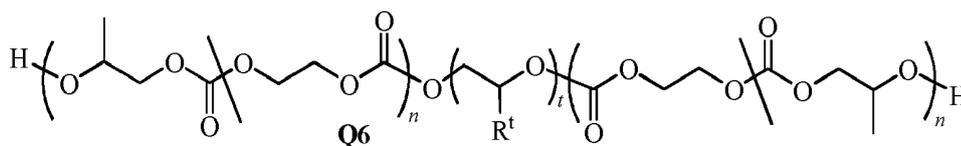
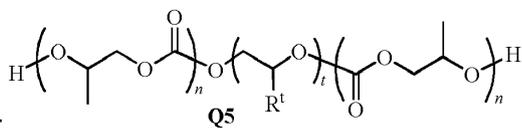
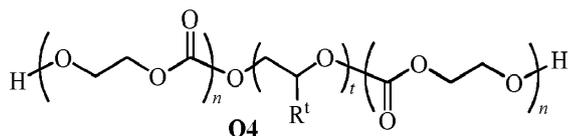
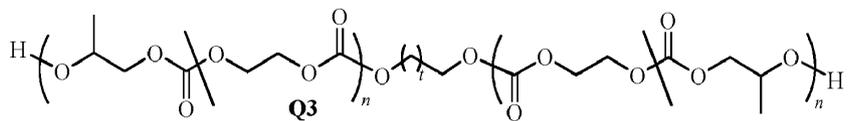
en donde el alcohol polihídrico un diol polimérico, preferiblemente en donde el diol polimérico se selecciona del grupo que consiste en poliéteres, poliésteres, poliolefinas terminadas en hidroxilo, copoliésteres de poliéter, poliéter policarbonatos, copoliésteres de policarbonato, polímeros de polioximetileno y análogos alcoxilados de cualquiera de estos.

5

11. La mezcla secundaria B según la reivindicación 1, en donde el polioliol de policarbonato alifático se selecciona del grupo que consiste en:



10



y

15 en donde t es un número entero entre 1 y 12 inclusive, y R^t es en forma independiente en cada caso -H o -CH₃.

12. La mezcla secundaria B según la reivindicación 1, que comprende 100 partes en peso de un componente de polioliol, en donde el polioliol de policarbonato alifático comprende entre 5 por ciento en peso y 100 por ciento en peso del componente de polioliol, donde preferiblemente:

20

además comprende (A) 0,01 a 20 partes en peso de uno o más agentes de soplado, preferiblemente en donde el agente de soplado comprende agua, o:

además comprende (B) 0 a 1 partes en peso de uno o más catalizadores, preferiblemente en donde el catalizador comprende estaño, o en donde el catalizador comprende un compuesto amina, o:

25

además comprende (C) 0 a 20 partes en peso de una o más moléculas pequeñas reactivas, en donde las moléculas pequeñas reactivas comprenden uno o más grupos funcionales seleccionados del grupo que consiste en hidroxilos, aminas, tioles y ácidos carboxílicos, preferiblemente en donde la molécula pequeña reactiva comprende un diol, o:

además comprende (D) 0 a 10 partes en peso de uno o más aditivos, en donde los aditivos se seleccionan del grupo que consiste en: compatibilizadores, colorantes, tensioactivos, retardantes de llamas, compuestos antiestática, antimicrobianos, estabilizantes de UV, plastificantes y abridores de celdas.

13. Una composición de poliuretano derivada de una mezcla secundaria B de una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 12 por reacción con uno o más compuestos isocianato,

en donde (A) la composición es una espuma microcelular, o:

en donde (B) la composición es un elastómero.

5 14. Uso de una mezcla secundaria B de una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 12 para la formulación de una composición de espuma microcelular o una composición de elastómero.