



República Federativa do Brasil
Ministério da Indústria, Comércio Exterior
e Serviços
Instituto Nacional da Propriedade Industrial

(11) PI 0616931-7 B1

(22) Data do Depósito: 18/09/2006

(45) Data de Concessão: 16/01/2018



(54) Título: RECIPIENTE DE MOLDAGEM POR SOPRO E ESTIRAMENTO, E, BEBIDA ACONDICIONADA

(51) Int.Cl.: C08K 5/00

(30) Prioridade Unionista: 05/10/2005 US 60/723,751

(73) Titular(es): THE COCA-COLA COMPANY. EASTMAN CHEMICAL COMPANY

(72) Inventor(es): YU SHI; FRANCIS M. SCHLOSS; DOYLE A. WEEMES

“RECIPIENTE DE MOLDAGEM POR SOPRO E ESTIRAMENTE, E, BEBIDA ACONDICIONADA”

Campo da invenção

Esta invenção refere-se a uma bebida acondicionada, e, mais particularmente, ao aumento das propriedades de barreira de dióxido de carbono e oxigênio de um recipiente para uma bebida acondicionada, aumentando com isso a vida-de-prateleira de seu conteúdo, mediante incorporação de um aditivo em poli(tereftalato de etileno) (PET) e seus copoliésteres.

Fundamentos da invenção

Poli(tereftalato de etileno) e seus copoliésteres (referidos a seguir coletivamente como "PET") são amplamente usados para preparar recipientes para refrigerantes carbonatados, suco, água, e análogos devido a sua excelente combinação de transparência, propriedades mecânicas e de barreira de gás. Apesar destas características desejáveis, insuficiente barreira de gás de PET a oxigênio e dióxido de carbono limita a aplicação de PET para embalagens de menor tamanho, e também para produtos de embalagem sensíveis a oxigênio, como cerveja, suco, e produtos de chá. Existe uma necessidade amplamente expressa na indústria de embalagem para aperfeiçoar ainda mais as propriedades de barreira de gás do PET.

A permeabilidade relativamente elevada de PET a dióxido de carbono limita o uso de recipientes menores em PET para embalagem de refrigerantes carbonatados. A taxa de permeação de dióxido de carbono através de recipientes de PET encontra-se na faixa de 3 a 14 cm³ por dia ou de 1,5 a 2 por cento por semana de taxa de perda à temperatura ambiente dependendo do tamanho do recipiente. Um recipiente menor tem uma maior relação de área de superfície para volume, resultando em uma maior taxa de perda relativa. Por esta razão, recipientes em PET são usados correntemente

apenas como recipientes maiores para a embalagem de refrigerantes carbonatados, enquanto que latas de metal e recipientes de vidro são a escolha para recipientes menores de refrigerantes carbonatados.

5 A quantidade de dióxido de carbono remanescente em um refrigerante carbonatado acondicionado determina sua vida-de-prateleira. Normalmente, recipientes de refrigerante carbonatado são enchidos com aproximadamente quatro volumes de dióxido de carbono por volume de água. É geralmente aceito que um refrigerante carbonatado acondicionado atinge o final de sua vida-de-prateleira quando 17,5 por cento do dióxido de carbono
10 no recipiente são perdidos em virtude da permeação do dióxido de carbono através da parede lateral do recipiente e do fecho. A permeabilidade do PET a dióxido de carbono determina, portanto, a vida-de-prateleira da bebida carbonatada acondicionada e, assim, a adequabilidade do PET como um material de acondicionamento.

15 Numerosas tecnologias foram desenvolvidas ou estão sendo desenvolvidas para aumentar a barreira do PET a pequenas moléculas de gás. Por exemplo, desenvolveu-se revestimentos externos ou internos para aumentar a barreira de gás de recipientes em PET. A camada de revestimento é normalmente uma camada de barreira muito elevada, seja inorgânica ou
20 orgânica, e diminui a taxa de difusão de gases. A implementação desta tecnologia, contudo, requer equipamento de revestimento não usado normalmente na manufatura de bebidas acondicionadas e, portanto, requer substancial investimento de capital, uso aumentado de energia, e maior espaço de solo. Em muitas plantas de embalagem de bebidas que já se encontram
25 congestionadas, espaço adicional não é uma opção.

Também se desenvolveu recipientes de camadas múltiplas com uma camada de barreira elevada inserida em forma de sanduíche entre uma ou mais camadas de PET. A implementação desta tecnologia também requer substancial investimento de capital e a deslaminação das camadas do

recipientes impacta sobre o aspecto, desempenho de barreira e mecânico dos recipientes.

Um aditivo de barreira para o PET ou um polímero com propriedades de barreira inerentes poderiam ser soluções preferidas. Nenhuma destas soluções requer investimento adicional de capital, e, portanto, não tem limitações inerentes com outras tecnologias. Também é possível adicionar um aditivo de barreira durante o processo de moldagem por injeção que proporciona mais flexibilidade para operações a jusante.

L. M. Robeson e J.A. Faucher revelam em *J. Polymer Science*, parte B 7, 35-40 (1969) que determinados aditivos podem ser incorporados em polímeros para aumentar seu módulo e propriedades de barreira de gás através de um mecanismo anti-plastificação. Este artigo divulga o uso de aditivos com policarbonato, cloreto de polivinila, óxido de polifenileno, e óxido de polietileno.

No WO 01/12521, Plotzker *et al.* propõem o uso de aditivos selecionados dentre 4-hidroxibenzoatos e moléculas relacionadas para aumentar as propriedades de barreira de gás do PET.

Este pedido de patente publicado divulga aditivos de barreira com a estrutura a seguir:

HO-AR-COOR, HO-AR-COOR1COO-AR-OH, HO-AR-CONHR, HO-AR-CO-NHR3-COO-AR-OH, HO-AR-CONHR2NHCO-AR-OH

Na estrutura precedente, AR é selecionado do grupo que consiste de naftaleno ou fenileno substituído ou não substituído. E R1, R2, e R3 são selecionados do grupo que consiste de grupos alquila com de C1 a C6, um grupo fenila, e um grupo naftila.

Os aditivos precedentes descritos na arte proporcionam apenas aperfeiçoamento moderado na barreira de PET, menos de 2,1 vezes (X) para barreira de oxigênio para os melhores exemplos com um nível de carga de 5

por cento em peso. Neste nível de carga PET experimental, contudo, degradação substancial e uma queda significativa da viscosidade intrínseca (IV, *intrinsic viscosity*). Embora diminuir o nível de aditivo reduza a degradação do PET, isto também reduz o fator de melhoramento de barreira, de forma que não existe benefício real no uso destes aditivos na embalagem de refrigerantes carbonatados ou de alimentos sensíveis a oxigênio. Parte da perda da IV [viscosidade intrínseca] deve-se à adição do aditivo molecular pequeno. Perda adicional de IV ocorre quando aditivos contêm grupos funcionais capazes de reagir com PET e causam a degradação do peso molecular. Aditivos com grupos funcionais reativos são usualmente mais solúveis em PET e, portanto, não conferem turbidez à garrafa. PET com uma IV significativamente menor não pode ser usado em recipientes de moldagem com sopro, como recipientes de bebidas. Adicionalmente, PET com IV mais baixo gera recipientes com baixo desempenho mecânico, como alongamento, impacto por queda, e análogos. Além disso, recipientes em PET preparados de PET com menor IV apresentam baixa resistência ao fendimento por esforço, que é indesejável em aplicações para recipiente.

PET foi modificado ou combinado com outros componentes para aumentar a barreira de gás do PET. Exemplos incluem copolímeros ou combinações de polietileno naftalato (PEN)/PET, PET modificado com isoftalato (IPA), PET combinado com polietileno isoftalato (PEI) ou uma poliamida, como nylon, e PET modificado com dióis à base de resorcinol. Para um copolímero de PET atingir aumento moderado de barreira de 2X ou maior, a modificação é normalmente acima de 10 a 20 por cento em peso ou mol dos co-monômeros totais. Quando PET é modificado a um nível tão elevado, as características de estiramento do PET são alteradas drasticamente de tal forma que o projeto da pré-forma do recipiente de PET normal não poderia ser usado na fabricação de recipientes. O uso destes copolímeros de PET para moldar pré-formas de recipientes de PET convencionais resulta em

- pré-formas que não podem ser totalmente estiradas e os recipientes finais são muito difíceis de preparar, se não impossíveis. Mesmo que seja possível preparar um recipiente do tipo referido, ele não mostra desempenho de barreira aperfeiçoado e mostra desempenho físico deteriorado, de tal forma
- 5 que não pode ser usado para acondicionar refrigerantes carbonatados. Patentes dos Estados Unidos nums. 5.888.598 e 6.150.450 revelam pré-formas de recipientes de PET re-projetadas com paredes laterais mais espessas para compensar a maior relação de estiramento. No entanto, esta pré-forma mais espessa exige novos moldes que requerem investimento de capital adicional.
- 10 A pré-forma mais espessa também é preparada a uma taxa menor de produtividade porque demora mais a esfriar e aquecer a pré-forma de parede mais espessa. Adicionalmente, combinações de PET com poliamida, como nylon, desenvolveram amarelidão e turbidez e não são transparentes como PET convencional.
- 15 Assim, há na arte uma necessidade de aumentar o desempenho de barreira do PET para uso em aplicações que exigirão barreira aumentada, como na embalagem de bebidas carbonatadas e alimentos e bebidas sensíveis a oxigênio, de uma maneira que não cause degradação substancial do PET, não impacte substancialmente sobre a relação de estiramento do PET, e não
- 20 impacte negativamente sobre a transparência do PET.

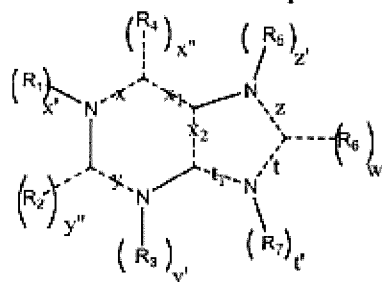
Sumário da invenção

- Esta invenção trata das necessidades descritas acima ao proporcionar um recipiente de poliéster com propriedades aumentadas de barreira de gás compreendendo uma composição de poliéster constituída de
- 25 poliéster e um derivado de purina.

De acordo com uma concretização particular, o poliéster na composição de poliéster compreende um copolímero à base de poli(tereftalato de etileno) (copolímero de PET). Em uma concretização particular, o poliéster compreende um copolímero de PET apresentando menos de 20 por cento de

modificação de componente diácido e/ou menos de 10 por cento modificação de componente diol, baseado em 100 por cento em mol de componente diácido e 100 por cento em mol de componente diol.

A composição de poliéster compreende desejavelmente um derivado de purina apresentando a estrutura química da Fórmula I



em que R_1 , R_3 , R_5 , e R_7 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, arilamino, alcóxi, arilóxi, alquenila, alquinila, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila;

em que t , t_1 , x , x_1 , x_2 , y , e z , independentemente um do outro, são uma ligação simples ou uma dupla ligação; em que t' , x' , y' , e z' , independentemente um do outro, são 0 ou 1; em que x'' , y'' , e w' , independentemente um do outro, são 1 ou 2;

em que quando x é uma dupla ligação, x_1 é uma ligação simples; em que quando x_1 é uma dupla ligação, x e x_2 são ligações simples; em que quando x_2 é uma dupla ligação, x_1 e t_1 são ligações simples; em que quando t é uma dupla ligação, t_1 e z são ligações simples; em que quando z é uma dupla ligação, t é uma ligação simples; em que quando t_1 é uma dupla ligação, t e x_2 são ligações simples; em que quando x é uma dupla ligação, x' é 0; em que quando x ou x_1 é uma dupla ligação, x'' é 1; em que quando y é uma dupla ligação, y' é 0 e y'' é 1; em que quando t ou t_1 é uma dupla ligação, t é 0; em que quando z e t são ligações simples, w' é 2; em que quando z ou t é uma dupla ligação, w' é 1; em que quando z é uma dupla ligação, z' é 0; em que quando x , y , ou z , independentemente um do outro, é uma ligação simples, e x' , y' , ou z' , independentemente um do outro, é 1;

em que R_2 , R_4 , e R_6 , independentemente um do outro, podem ser porções ligadas por uma ligação simples ou uma dupla ligação;

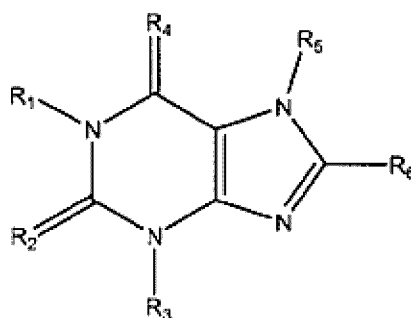
em que quando R_2 , R_4 , ou R_6 é uma porção ligada por uma ligação simples, R_2 , R_4 e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou
 5
 10 cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila;

em que quando R_2 , R_4 , ou R_6 é uma porção ligada por uma dupla ligação, R_2 , R_4 , ou R_6 , independentemente um do outro, compreendem oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; R_8 e R_9 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de
 15 cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila; e R_{10} compreende um grupo hidrogênio, arilamino, alcóxi, arilóxi, alquenila, alquinila, ou um grupo alquila de cadeia
 20 reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila; e

em que quando x'' é 2, ambas as porções R_2 podem ser iguais ou diferentes; em que quando y'' é 2, ambas as porções R_4 podem ser iguais ou diferentes; e em que quando w' é 2, ambas as porções R_6 podem ser iguais ou diferentes.

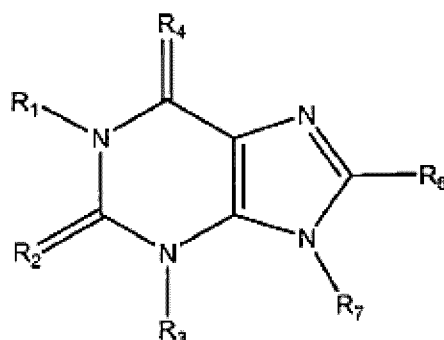
Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da

Fórmula II



- em que t_1 , x , x_1 , y , e z são ligações simples; em que x_2 e t são duplas ligações; em que w' , x' , y' , z' , x'' , e y'' são 1; em que t' é 0; em que R_2 e R_4 , independentemente um do outro, são porções ligadas por uma dupla ligação
- 5 compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_3 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfínila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter,
- 10 anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

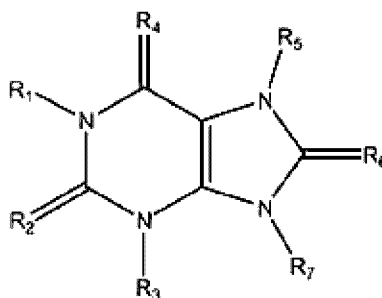
- Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da
- 15 Fórmula III



em que x , x_1 , y , e t , e t_1 são ligações simples; em que x_2 e z são duplas ligações; em que t' , w' , x' , y' , x'' , e y'' são 1; em que z' é 0; em que R_2 e R_4 , independentemente um do outro, são porções ligadas por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_3 , R_6 ,

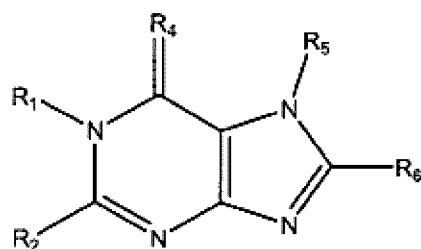
e R_7 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula IV



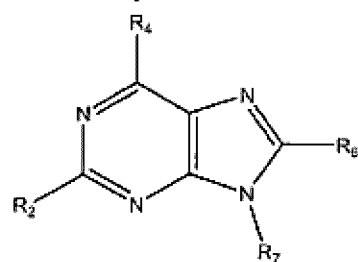
em que x , x_1 , y , t , t_1 , e z são ligações simples; em que x_2 é uma dupla ligação; em que t' , w' , x' , y' , z' , x'' , e y'' são 1; em que R_2 , R_4 , e R_6 , independentemente um do outro, são porções ligadas por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_3 , R_5 , e R_7 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula V



em que x , x_1 , t_1 , e z são ligações simples; em que x_2 , t , e y são duplas ligações; em que w' , x' , z' , x'' , e y'' são 1; em que y' e t' são 0; em que R_4 é uma porção ligada por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_2 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

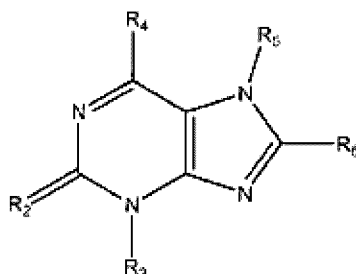
Em outra concretização, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula VI



em que x , x_2 , y e z são duplas ligações; em que x_1 , t , e t_1 são ligações simples; em que t' , w' , x'' , e y'' são 1; em que x' , y' , e z' são 0; e em que R_2 , R_4 , R_6 , e R_7 compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila,

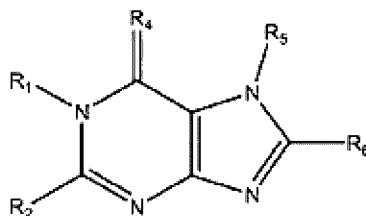
heterocíclico, ou acila.

Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula VII



- 5 em que x , x_2 , e t são duplas ligações; em que t_1 , x_1 , y e z são ligações simples; em que w' , y' , z' , x'' , e y'' são 1; em que t' e x' são 0; em que R_2 é uma porção ligada por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_3 , R_4 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.
- 10
- 15

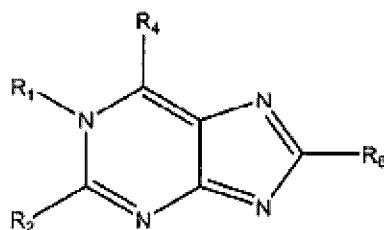
Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula VIII



- em que x_2 , y e t são duplas ligações; em que x , x_1 , t_1 , e z são ligações simples; em que w' , x' , z' , x'' , e y'' são 1; em que t' e y' são 0; em que R_4 é uma porção ligada por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 ,
- 20

ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_2 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula IX



em que x_1 , y , t_1 , e z são duplas ligações; em que x , x_2 , e t são ligações simples; em que w' , x' , x'' , e y'' são 1; em que t' , y' , e z' são 0; e em que R_1 , R_2 , R_4 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

De acordo com outra concretização, esta invenção compreende um método para aumentar as propriedades de barreira de gás de um recipiente em poliéster compreendendo combinar um poliéster com um derivado de purina para formar uma composição de poliéster. De acordo com concretizações particulares, a composição de poliéster pode ser formada em

artigos, como um recipiente.

Adicionalmente, em outra concretização da invenção, a etapa de formar o recipiente compreende moldagem com sopro e estiramento. Concretizações particulares desta invenção proporcionam recipientes em poliéster, como recipientes em PET, com barreira de gás aumentada, e, em particular, barreira de gás aumentada a dióxido de carbono e oxigênio. Isto torna determinadas concretizações da invenção particularmente adequadas para embalagem de refrigerantes carbonatados e alimentos e bebidas sensíveis a oxigênio. Concretizações particulares proporcionam esta barreira de gás aumentada ao mesmo tempo em que conservam transparência e propriedades físicas aceitáveis.

Outros objetos, características e vantagens da invenção serão aparentes a partir da descrição detalhada a seguir, e das reivindicações.

Breve descrição dos desenhos

Fig. 1 é um diagrama esquemático de um sistema para preparar um recipiente em PET com barreira de gás aumentada de acordo com uma concretização desta invenção.

Fig. 2 é vista seccional em elevação de uma pré-forma de recipiente moldada preparada de acordo com uma concretização desta invenção.

Fig. 3 é vista seccional em elevação de um recipiente moldado com sopro preparado a partir da pré-forma da Fig. 2 de acordo com uma concretização desta invenção.

Fig. 4 é uma vista em perspectiva de uma bebida acondicionada preparada de acordo com uma concretização desta invenção.

Descrição detalhada da invenção

Esta invenção compreende um recipiente em poliéster com propriedades aumentadas de barreira de gás e um método para preparar um recipiente em poliéster com propriedades aumentadas de barreira de gás. Recipientes em poliéster e métodos para preparar referidos recipientes preparados de acordo

com concretizações desta invenção são descritas adicionalmente abaixo e nas FIGS. 1-4 anexas.

1. Composição de poliéster

5 Esta invenção é aplicável a qualquer poliéster e é vantajosa para usos em que uma barreira de gás elevada é desejável. Poliésteres vantajosos para uso em concretizações desta invenção incluem copolímeros de PET, poli(naftalato de etileno) (PEN), poli(isoftalato de etileno), e análogos. Copolímeros de PET são particularmente úteis porque são usados para muitas aplicações de barreira, como películas e recipientes. Recipientes
10 vantajosos incluem, embora sem limitação, frascos, tambores, garrafas, resfriadores, e análogos.

Copolímeros de PET vantajosos para uso em concretizações desta invenção compreendem um componente diol apresentando unidades repetitivas de etileno glicol e um componentes diácido apresentando unidades
15 repetitivas de ácido tereftálico. Em concretizações particulares, o copolímero de PET apresenta menos de 20 por cento de modificação de diácido, 10 por cento de modificação de glicol, ou ambos, baseado em 100 por cento em mol de componentes diácido e 100 por cento em mol de componente diol. Referidos copolímeros de PET são bem conhecidos.

20 Poliésteres, incluindo copolímeros de PET, apresentam volume livre entre as cadeias de polímero. Como o sabem aqueles com prática na arte, a quantidade de volume livre em poliésteres, como copolímeros de PET, determina sua barreira a moléculas de gás. Quanto menor o volume livre, tanto menor a difusão de gás, e tanto maior a barreira a moléculas de
25 gás. Desejavelmente, o aditivo aumentador de barreira de gás encontra-se disposto pelo menos parcialmente no volume livre do poliéster entre as cadeias de poliéster.

Em uma concretização particular, uma composição de poliéster compreende um poliéster e um aditivo para barreira de gás

aumentada compreendendo um derivado de purina, que é descrito adicionalmente abaixo. O derivado de purina da composição de poliéster aumenta as propriedades de barreira de gás da composição de poliéster a baixos níveis de carga, desejavelmente na faixa de cerca de 0,2 a cerca de 10 por cento em peso da composição de poliéster, mais desejavelmente na faixa de cerca de 3 a cerca de 10 por cento em peso da composição de poliéster, e ainda mais desejavelmente na faixa de cerca de 3 a cerca de 5 por cento em peso da composição de poliéster. A baixos níveis de carga, ocorre um ligeiro aumento de fator de barreira (BIF). Embora o aperfeiçoamento no BIF seja substancial a altos níveis de carregamento, as propriedades físicas do PET deterioram-se e tornam mais difícil a formação de um recipiente. O BIF é uma medida de propriedades aumentadas de barreira de gás (a relação da taxa de transmissão de gás de uma composição de poliéster sem um aditivo para a taxa de transmissão de gás de uma composição de poliéster com um aditivo).

De acordo com outra concretização, a composição de poliéster compreende:

a) um poliéster presente na composição de poliéster numa quantidade na faixa de cerca de 90 a cerca de 99,8 por cento em peso da composição de poliéster; e

b) um derivado de purina presente na composição de poliéster numa quantidade na faixa de cerca de 0,2 a cerca de 10 por cento em peso da composição de poliéster.

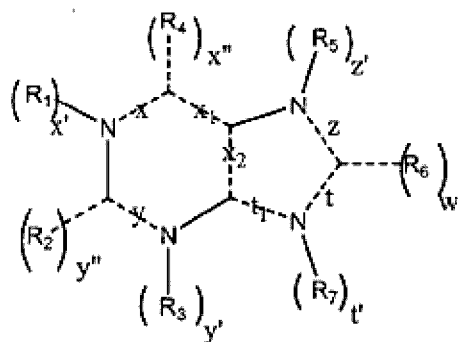
Em uma concretização particular, o poliéster compreende um copolímero à base de poli(tereftalato de etileno) apresentando menos de 20 por cento de modificação de diácido, 10 por cento de modificação de glicol, ou ambos, baseado em 100 por cento em mol componentes diácido e 100 por cento em mol componente diol.

Em outra concretização particular, o derivado de purina está presente na composição de poliéster numa quantidade na faixa de cerca de 3 a

cerca de 10 por cento em peso da composição de poliéster. Em outra concretização particular, o derivado de purina está presente na composição de poliéster numa quantidade na faixa de cerca de 3 a cerca de 5 por cento em peso da composição de poliéster.

5 II. Derivados de purina

Em uma concretização particular, um derivado de purina apresenta a estrutura química de Fórmula I



em que R_1 , R_3 , R_5 , e R_7 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, arilamino, alcóxi, arilóxi, alquenila, alquinila, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila;

em que t , t_1 , x , x_1 , x_2 , y , e z , independentemente um do outro, são uma ligação simples ou uma dupla ligação; em que t' , x' , y' , e z' , independentemente um do outro, são 0 ou 1; em que x'' , y'' , e w' , independentemente um do outro, são 1 ou 2;

em que quando x é uma dupla ligação, x_1 é uma ligação simples; em que quando x_1 é uma dupla ligação, x e x_2 são ligações simples; em que quando x_2 é uma dupla ligação, x_1 e t_1 são ligações simples; em que quando t é uma dupla ligação, t_1 e z são ligações simples; em que quando z é uma dupla ligação, t é uma ligação simples; em que quando t é uma dupla ligação, t e x_2 são ligações simples; em que quando x é uma dupla ligação, x' é 0; em que quando x ou x_1 é uma dupla ligação, x'' é 1; em que quando y é uma dupla ligação, y' é 0 e y'' é 1; em que quando t ou t_1 é uma dupla ligação, t' é 0; em que quando z e t são ligações simples, w' é 2; em que quando z ou t

é uma dupla ligação, w' é 1; em que quando z é uma dupla ligação, z' é 0; em que quando x , y , ou z , independentemente um do outro, é uma ligação simples, e x' , y' , ou z' , independentemente um do outro, é 1;

em que R_2 , R_4 , e R_6 , independentemente um do outro, podem ser porções ligadas por uma ligação simples ou uma dupla ligação; em que quando R_2 , R_4 , ou R_6 é uma porção ligada por uma ligação simples, R_2 , R_4 e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfínila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila;

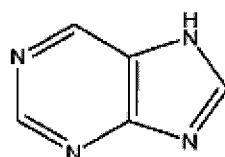
em que quando R_2 , R_4 , ou R_6 é uma porção ligada por uma dupla ligação, R_2 , R_4 , ou R_6 , independentemente um do outro, compreendem oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; R_8 e R_9 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfínila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila; e R_{10} compreende um hidrogênio, arilamino, alcóxi, arilóxi, alquenila, alquinila, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

em que quando x'' é 2, ambas as porções R_2 podem ser iguais ou diferentes; em que quando y'' é 2, ambas as porções R_{4i} podem ser iguais ou diferentes; e em que quando w' é 2, ambas as porções R_{6i} podem ser iguais

ou diferentes.

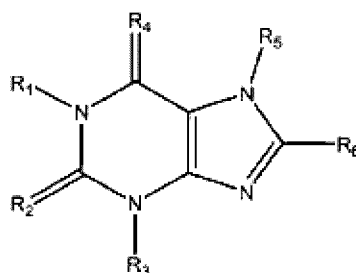
As porções descritas acima podem ser substituídas adicionalmente como é de conhecimento de alguém com prática na arte com um grupo hidrogênio, halogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, e qualquer outro grupo funcional viável.

- 10 Em uma concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende 7H-purina, apresentando a estrutura química



em que x , x_2 , y , e t são duplas ligações; em que x_1 , t_1 e z são ligações simples; em que x' , y' , e t' são 0; em que x'' , y'' , z' , e w' são 1; e em que R_2 , R_4 , R_5 , e R_6 são hidrogênio.

- 15 Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula II



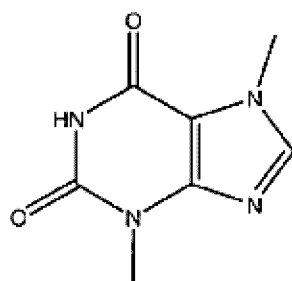
- 20 em que t_1 , x , x_1 , y , e z são ligações simples; em que x_2 e t são duplas ligações; em que w' , x' , y' , z' , x'' , e y'' são 1; em que f é 0; em que R_2 e R_4 , independentemente um do outro, são porções ligadas por uma dupla ligação compreendendo um oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_3 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo

hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou

5 cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila, em que as porções podem ser substituídas adicionalmente como descrito acima.

Em uma concretização particular do composto de Fórmula II, o derivado de purina compreende teobromina, uma purina diona apresentando

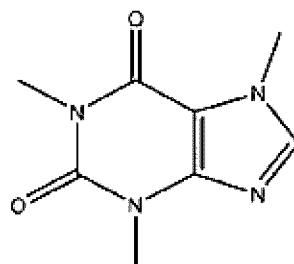
10 a estrutura química



em que R_1 e R_6 são hidrogênio; em que R_2 e R_4 são oxigênio; e em que R_3 e R_5 são metila.

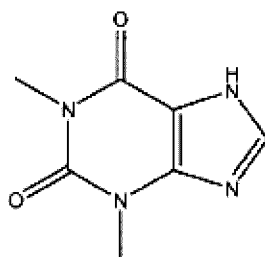
Em outra concretização do composto de Fórmula II, o derivado de purina compreende cafeína, uma purina diona apresentando a

15 estrutura química



em que R_6 é hidrogênio; R_2 e R_4 são oxigênio; e R_1 , R_3 e R_5 são metila.

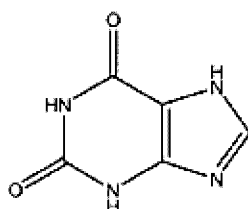
Em outra concretização adicional do composto de Fórmula II, o derivado de purina compreende teofilina, uma purina diona apresentando a estrutura química



em que R_5 e R_6 são hidrogênio; em que R_2 e R_4 são oxigênio; e em que R_1 e R_3 são metila.

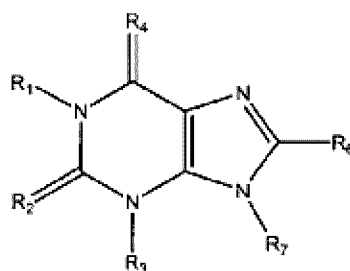
Em outra concretização adicional do composto de Fórmula II, o derivado de purina compreende xantina, uma purina diona apresentando a

5 estrutura química



em que R_1 , R_3 , R_5 e R_6 são hidrogênio; e R_2 e R_4 são oxigênio.

Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula III

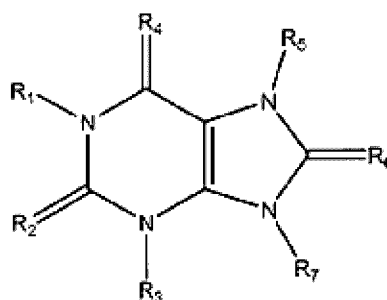


10 em que x , x_1 , y , e t , e t_1 são ligações simples; em que x_2 e z são duplas ligações; em que t' , w' , x' , y' , x'' , e y'' são 1; em que z' é 0; em que R_2 e R_4 , independentemente um do outro, são porções ligadas por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_3 , R_6 , e R_7 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio,

15 hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfínila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter,

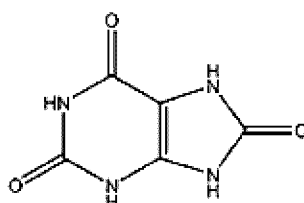
anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila, em que as porções podem ser substituídas adicionalmente como descrito acima.

- 5 Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula IV



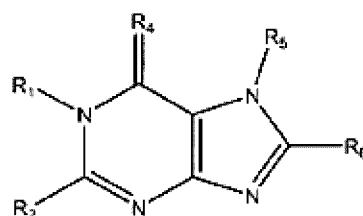
- em que x, x₁, y, t, t₁, e z são ligações simples; em que x₂ é uma dupla ligação; em que f, w', x', y', z', x'', e y'' são 1; em que R₂, R₄, e R₆, independentemente um do outro, são porções ligadas por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR₈R₉, SO₂, ou NR₁₀; e em que R₁, R₃, R₅, e R₇, independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila, em que as porções podem ser substituídas adicionalmente como descrito acima.
- 10
- 15

- Em uma concretização particular do composto de Fórmula IV, o derivado de purina compreende ácido úrico, uma purina diona apresentando a estrutura química
- 20



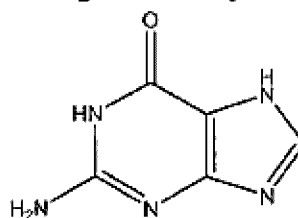
em que R_1 , R_3 , R_5 e R_7 são hidrogênio; e em que R_2 , R_4 , e R_6 são oxigênio.

Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula V



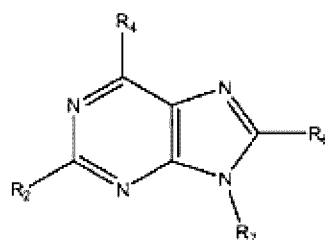
- 5 em que x , x_1 , t_1 , e z são ligações simples; em que x_2 , t , e y são duplas ligações; em que w' , x' , z' , x'' , e y'' são 1; em que y' e t' são 0; em que R_4 é uma porção ligada por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_2 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, 10 sulfô, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, 15 heteroarila, heterocíclico, ou acila, em que as porções podem ser substituídas adicionalmente como descrito acima.

Em uma concretização particular do composto de Fórmula V, o derivado de purina compreende guanina, apresentando a estrutura química



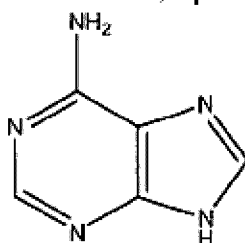
- 20 em que R_1 , R_5 , e R_6 são hidrogênio; em que R_2 é amino; e em que R_4 é oxigênio.

Em outra concretização, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula VI



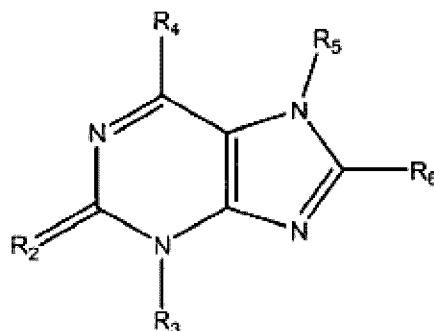
em que x , x_2 , y e z são duplas ligações; em que x_1 , t , e t_1 são ligações simples; em que t' , w' , x'' , e y'' são 1; em que x' , y' , e z' são 0; e em que R_2 , R_4 , R_6 , e R_7 compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoila, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila, em que as porções podem ser substituídas
5
10 adicionalmente como descrito acima.

Em uma concretização particular do composto de Fórmula VI, o derivado de purina compreende adenina, apresentando a estrutura química



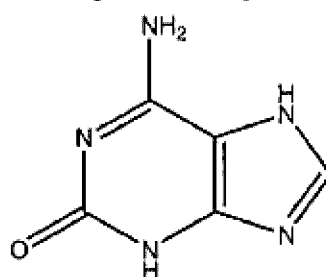
em que R_2 , R_6 , e R_7 são hidrogênio; e em que R_4 é um amino.

Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da
15 Fórmula VII



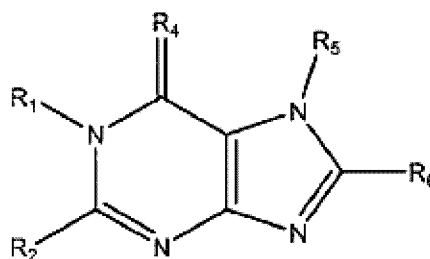
- em que x , x_2 , e t são duplas ligações; em que t_1 , x_1 , y e z são ligações simples; em que w' , y' , z' , x'' , e y'' são 1; em que t' e x' são 0; em que R_2 é uma porção ligada por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_3 , R_4 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila, em que as porções podem ser substituídas adicionalmente como descrito acima.

Em uma concretização particular do composto de Fórmula VII, o derivado de purina compreende guanina, apresentando a estrutura química



- em que R_3 , R_5 , e R_6 são hidrogênio; em que R_2 é oxigênio; e em que R_4 é amino.

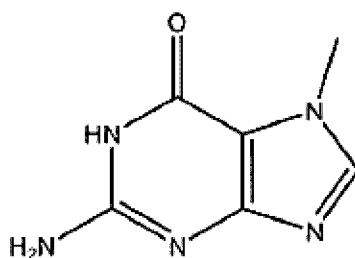
Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula VIII



- em que x_2 , y e t são duplas ligações; em que x , x_1 , t_1 , e z são ligações simples;

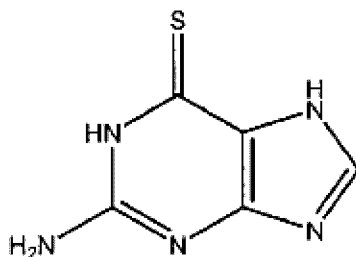
em que w' , x' , z' , x'' , e y'' são 1; em que t' e y' são 0; em que R_4 é uma porção ligada por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_2 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoila, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila, em que as porções podem ser substituídas adicionalmente como descrito acima.

Em uma concretização particular do composto de Fórmula VIII, o derivado de purina compreende 7-metilguanina, apresentando a estrutura química



em que R_1 e R_6 são hidrogênio; em que R_2 é amino; em que R_4 é oxigênio, e em que R_5 é metila.

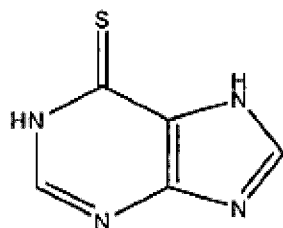
Em outra concretização particular do composto de Fórmula VIII, o derivado de purina compreende tioguanina, apresentando a estrutura química



em que R_1 , R_5 , e R_6 são hidrogênio; em que R_2 é amino; e em que R_4 é

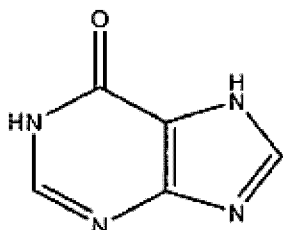
enxofre.

Em outra concretização adicional do composto de Fórmula VIII, o derivado de purina compreende 6-mercaptopurina, apresentando a estrutura química



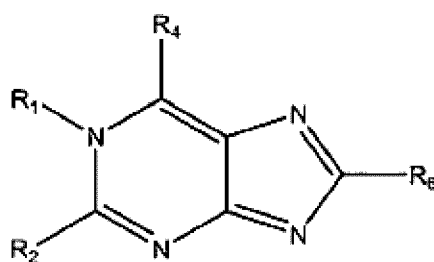
5 em que R_1 , R_2 , R_5 , e R_6 são hidrogênio; e em que R_4 é enxofre.

Em outra concretização adicional do composto de Fórmula VIII, o derivado de purina compreende hipoxantina, apresentando a estrutura química



em que R_1 , R_2 , R_5 , e R_6 são hidrogênio; e em que R_4 é oxigênio.

10 Em outra concretização do composto de Fórmula I, o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula IX

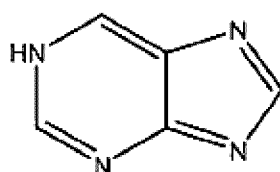


em que x_1 , y , t_1 , e z são duplas ligações; em que x , x_2 , e t são ligações simples; em que w' , x' , x'' , e y'' são 1; em que t' , y' , e z' são 0; e em que R_1 , R_2 , R_4 , e R_6 ,

15 independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila,

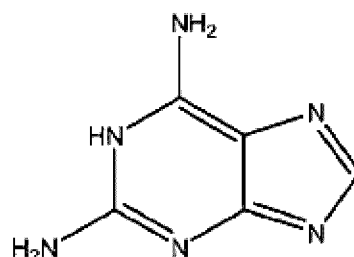
- sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila, em que as porções podem ser substituídas adicionalmente como descrito acima.

Em uma concretização particular do composto de Fórmula IX, o derivado de purina compreende 1H-purina, apresentando a estrutura química



em que R_1 , R_2 , R_4 , e R_6 são hidrogênio.

- Em outra concretização particular do composto de Fórmula IX, o derivado de purina compreende diaminopurina, apresentando a estrutura química



em que R_1 e R_6 são hidrogênio; e em que R_2 e R_4 são amino.

- O termo "alquila", como usado aqui, exceto se especificado de outra forma, refere-se a um hidrocarboneto saturado de cadeia reta, ramificada, ou cíclica, primário, secundário, ou terciário com de C1 a C20, e inclui particularmente metila, etila, propila, isopropila, butila, isobutyla, t-butyla, pentila, isopentila, neopentila, hexila, e isoexila. O termo inclui tanto grupos alquila substituídos como também não-substituídos. Porções com as quais o grupo alquila pode ser substituído são selecionadas do grupo que consiste de hidrogênio, halogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo,

sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, e qualquer outro grupo funcional viável.

5 O termo "alquenila", como referida aqui, e exceto se especificado de outra forma, refere-se a hidrocarboneto de cadeia reta, ramificada, ou cíclica com de C2 a C10 com pelo menos uma dupla ligação. Os grupos alquenila podem ser opcionalmente substituídos da mesma maneira como descrito acima para o grupo alquila e, também podem ser
10 opcionalmente substituídos por uma grupo alquila substituído ou não substituído.

 O termo "alquinila", como usado aqui, e exceto se especificado de outra forma, refere-se a um hidrocarboneto com de C2 a C10 de cadeia reta ou ramificada com pelo menos uma tripla ligação. Os grupos alquinila podem
15 ser opcionalmente substituídos da mesma maneira como descrito acima para os grupos alquila e também podem ser opcionalmente substituídos por um grupo alquila substituído ou não-substituído.

 O termo "arila", como usado aqui, e exceto se especificado de outra forma, refere-se a qualquer grupo funcional ou substituinte derivado de
20 um anel aromático. Exemplos não-limitantes incluem fenila, bifenila, ou naftila. O termo inclui porções tanto substituídas como também não-substituídas. O grupo arila pode ser opcionalmente substituído por uma ou mais porções como descrito acima para os grupos alquila ou um grupo alquila substituído ou não substituído.

25 O termo "heteroarila" ou "heteroaromático", como usado aqui, refere-se a uma porção cíclica aromática ou insaturada que inclui pelo menos um enxofre, oxigênio, nitrogênio, ou fósforo no anel aromático. Exemplos não-limitantes são furila, piridila, pirimidila, tienila, isotiazolila, imidazolila, tetrazolila, pirazinila, benofuranila, benothiofenila, quinolila, isoquinolila,

benzotienila, ixobenzofurila, pirazolila, indolila, isoindolila, benimidazolila, purinila, carbazolila, oxazolila, tiazolila, isotiazolila, 1,2,4-tiadiazolila, isoxazolila, pirolila, quinazolinila, piridazinila, pirazinila, cinolila, ftalazinila, quinoxalinila, xantinila, hipoxantinila, e pteridinila. O grupo heteroarila ou heteroaromático pode ser opcionalmente substituído por uma ou mais porções como descrito acima para o grupo alquila ou um grupo alquila substituído ou não-substituído.

O termo "heterocíclico" refere-se a um grupo cíclico não-aromático saturado que pode ser opcionalmente substituído, e em que há pelo menos um heteroátomo ou átomo não-carbono, como oxigênio, enxofre, nitrogênio, ou fósforo no anel. O grupo heterocíclico pode ser opcionalmente substituído da mesma maneira como descrito acima para o grupo heteroarila.

O termo "aralquila", como usado aqui, e exceto se especificado de outra forma, refere-se a um grupo arila como definido acima ligado à molécula por meio de um grupo alquila como definido acima. O termo alcarila, como usado aqui, e exceto se especificado de outra forma, refere-se a um grupo alquila como definido acima ligado à molécula através de um grupo arila como definido acima. O grupo aralquila ou alcarila pode ser opcionalmente substituído por uma ou mais porções selecionadas do grupo que consiste de hidroxila, carbóxi, carboxamido, carboalcóxi, acila, amino, halo, alquilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, ciano, sulfo, sulfato, fosfo, fosfato, e fosfonato.

O termo "halo", como usado aqui, inclui especificamente cloro, bromo, iodo, e flúor.

O termo "alcóxi", como usado aqui, e exceto se especificado de outra forma, refere-se a uma porção da estrutura -O-alquila, em que alquila é como definido acima.

O termo "acila", como usado aqui, refere-se a um grupo da fórmula $C(O)R^1$, em que R^1 é um grupo alquila, arila, heteroarila,

heterocíclico, alcarila ou aralquila, ou alquila substituído, arila, heteroarila, heterocíclico, aralquila ou alcarila, em que estes grupos são como definido acima.

II. Métodos de preparar composição de poliéster e recipientes

5 Como descrito acima, a composição de poliéster desta invenção é útil para preparar recipientes em que barreira de gás aumentada é desejável. Resumidamente, referidos recipientes são preparados formando-se as composições de poliéster descritas acima no recipiente desejado por meio de métodos convencionais, como formação de massa fundida. Processos
10 vantajosos para formação de massa fundida incluem, embora sem limitação, moldagem com injeção, extrusão, formação térmica e moldagem com compressão. O método particularmente preferido para preparação dos recipientes desta invenção é a moldagem com sopro e estiramento.

 Métodos para incorporar o aditivo de derivado de purina no
15 recipiente e composição de poliéster também são proporcionados aqui. Referidos métodos também são bem conhecidos por aqueles com prática na arte. Por exemplo, um aditivo pode ser introduzido diretamente no poliéster durante o processo de moldagem com injeção, previamente combinado com a resina de poliéster antes da moldagem com injeção, ou incorporado em altas
20 concentrações com PET como mistura padrão e, depois, misturado com a resina de poliéster antes da moldagem com injeção do recipiente.

 Fig. 1 ilustra um sistema 10 de acordo com uma concretização desta invenção para preparar uma pré-forma de recipiente rígido 12 (ilustrado na Fig. 2) e um recipiente rígido 14 (ilustrado na Fig. 3) a partir da pré-forma.
25 Como é mostrado na Fig. 1, PET 20 e um aditivo aumentador de barreira de gás 22, como um derivado de purina, são adicionados em um alimentador ou funil de alimentação 24 que fornece os componentes a uma extrusora de massa fundida quente 26 em que os componentes são fundidos e combinados. A extrusora de massa fundida quente 26 extrusa então a mistura fundida de

PET 20 e aditivo aumentador de barreira de gás 22 em um dispositivo de moldagem com injeção 28 para formar a pré-forma 12.

5 A pré-forma 12 é resfriada e removida do dispositivo de moldagem com injeção 28 e é fornecida a um dispositivo de moldagem com sopro e estiramento 30 que molda com sopro e estiramento a pré-forma 12 a um recipiente rígido acabado 14.

10 O tempo de residência da massa fundida da produção de pré-forma é, de preferência, inferior a cinco minutos e, mais preferivelmente, de cerca de um a cerca de três minutos. As temperaturas de fusão são, desejavelmente, de cerca de 270 a cerca de 300⁰C e, mais desejavelmente, de cerca de 270 a cerca de 290⁰C. O tempo de residência da massa fundida começa quando o PET 20 e aditivo aumentador de barreira de gás 22 entram na extrusora de massa fundida 26 e começa a fundir, e termina após injeção da mistura fundida no molde de injeção para formar a pré-forma 12.

15 Em uma concretização particular, o processo de moldagem com injeção pode ser modificado pressurizando-se a cavidade do molde para minimizar formação de placa, como descrito no pedido de patente co-pendente dos E.U.A. intitulado "Pressurized Tooling for Injection Molding and Method of Using" [Ferramental pressurizado para moldagem com injeção
20 e método de uso], que é incorporado integralmente por referência, e foi depositado em 15 de setembro de 2006, por Schultheis, *et al.* Pressurização da cavidade do molde altera a dinâmica do ciclo de processamento reduzindo ou eliminando completamente a capacidade de aditivos se difundirem através do copolímero de PET e se depositarem na superfície interna do molde. A
25 pressão desejada da cavidade do molde pode ser otimizada para um material de polímero, matriz de polímero, ou aditivo particular. O processo de moldagem com injeção modificado (não ilustrado) inclui a etapa adicional de pressurizar um molde por meio de introdução de um gás pressurizado em uma cavidade do molde no molde, em que a cavidade do
30 molde define a forma da pré-forma do recipiente; introduzir uma composição

de poliéster na cavidade do molde; resfriar a composição de poliéster para formar a pré-forma do recipiente; e remover a pré-forma do recipiente da cavidade do molde.

5 O gás pressurizado pode ser qualquer gás que não afete prejudicialmente a composição de poliéster. Exemplos não-limitantes incluem ar e seus componentes individuais, oxigênio, nitrogênio, e dióxido de carbono; os gases nobres, argônio, neônio, hélio, e xenônio; e misturas dos mesmos. Em uma concretização particular, a cavidade do molde é pressurizada a uma pressão na faixa de cerca de 1 a cerca de 1000 psig (6900
10 kPa man.).

III. Recipientes

Como é do conhecimento daqueles versados na arte, é possível preparar recipientes por meio de moldagem com sopro de uma pré-forma de recipiente. Exemplos de estruturas vantajosas de pré-forma e recipiente
15 encontram-se divulgados na Patente dos Estados Unidos nº 5.888.598, cuja revelação é incorporada aqui expressamente por referência.

Um pré-forma de recipiente em poliéster 12 é ilustrada na Fig. 2. Esta pré-forma 12 é preparada por meio de moldagem com injeção de resina à base de PET e compreende um acabamento de gragalo rosqueado 112
20 que termina, em sua ponta inferior, num flange da tampa 114. Abaixo do flange da tampa 114, há uma seção geralmente cilíndrica 116 que termina numa seção 118 de diâmetro externo gradualmente crescente de forma a proporcionar uma espessura crescente da parede. Abaixo da seção 118 há uma seção de corpo alongada 120.

25 A pré-forma 12 ilustrada na Fig. 2 pode ser moldada por sopro-estiramento para formar um recipiente 14 ilustrado nas Figs. 3 e 4. O recipiente 14 compreende um invólucro 124 compreendendo um acabamento de gragalo rosqueado 126 definindo uma boca 128, um flange da tampa 130 abaixo do acabamento de gragalo rosqueado, uma seção afunilada 132

estendendo-se desde o flange da tampa, uma seção de corpo 134 estendendo-se abaixo da seção afunilada, e uma base 136 no fundo do recipiente. O recipiente 14 é usado vantajosamente para preparar uma bebida acondicionada 138, como ilustrado na Fig. 4. A bebida acondicionada 138
5 inclui uma bebida, como uma bebida de soda carbonatada disposta no recipiente 14 e um fecho 140 que fecha hermeticamente a boca 128 do recipiente.

O recipiente em poliéster opcionalmente pode compreender uma pluralidade de camadas como descrito no pedido de patente co-pendente
10 com número 60/825.861 depositado em 15 de setembro de 2006, intitulado "Multilayer Container having Small Molecule Barrier Additives" [recipiente de múltiplas camadas apresentando aditivos de barreira de molécula pequena], cuja revelação é incorporada aqui expressamente por referência. Um recipiente de camadas múltiplas pode permitir o uso de aditivos em uma
15 camada de barreira que normalmente seria volátil demais para inclusão em um recipiente de camada simples porque o aditivo de baixo peso molecular está contido no interior de duas camadas exteriores sem o aditivo de baixo peso molecular, impedindo contato com o aditivo de baixo peso molecular e as superfícies do aparelho de moldagem com injeção.

20 Descrito de maneira resumida, um recipiente de camadas múltiplas compreende pelo menos duas camadas exteriores compreendendo uma matriz de polímero e pelo menos uma camada de barreira disposta entre as pelo menos duas camadas exteriores. A pelo menos uma camada de barreira compreende uma composição de poliéster compreendendo um
25 poliéster e um aditivo para barreira de gás aumentada compreendendo um derivado de purina. Desejavelmente, o aditivo de baixo peso molecular está presente no recipiente de camadas múltiplas numa quantidade na faixa de cerca de 0,2 a cerca de 10 por cento em peso do recipiente, as pelo menos duas camadas exteriores compreendem cerca de 99 a cerca de 20 por cento

em peso do recipiente, e a uma ou mais camadas de barreira compreendem cerca de 1 a cerca de 80 por cento em peso do recipiente. Em outra concretização particular, o recipiente de camadas múltiplas compreende adicionalmente pelo menos uma camada intermediária entre a pelo menos uma camada de barreira e as pelo menos duas camadas exteriores.

A pré-forma 12, recipiente 14, e bebida acondicionada 138 são apenas exemplos de aplicações que usam as pré-formas da presente invenção. Portanto, deveria-se compreender que o processo e dispositivo da presente invenção podem ser usados para preparar pré-formas e recipientes apresentando uma variedade de configurações.

A presente invenção é ilustrada adicionalmente com os exemplos a seguir, que não devem se interpretados de qualquer forma como impondo limitações sobre o escopo da mesma. Ao contrário, deve-se compreender claramente que é possível recorrer a várias outras concretizações, modificações, e equivalentes das mesmas que, após leitura da descrição aqui apresentada, podem sugerir-se àqueles versados na arte sem afastar-se do espírito da presente invenção e/ou do escopo das reivindicações anexas.

Exemplos

Exemplo 1

Uma resina de classe de recipiente de poliéster comercialmente obtenível (Kosa, Spartanburg, South Carolina) foi secada em uma estufa a vácuo a 140°C de um dia para o outro, em um nível de umidade abaixo de 50 ppm. Os aditivos foram secados em uma estufa a vácuo a 70°C de um dia para o outro para remover umidade superficial. Recipientes foram preparados com o PET, tanto sozinho como em combinação com quantidades variáveis de aditivos. Usou-se uma máquina de moldagem com injeção de cavidade unitária Arburg em escala de laboratório. As pré-formas foram moldadas com sopro com uma máquina de moldagem com sopro Sidel SBO

2/3 para preparar recipientes com contorno aceitável. Uma pré-forma de 24,5 g deu um recipiente de 500 ml.

As taxas de transmissão de oxigênio dos recipientes foram então medidas usando-se um instrumento Mocon modelo 2/60 a 22,2°C e 50 % de umidade relativa (RH) com as taxas de N₂/H₂ (99:1) e purga de ar de 10 ml/min em ambos os lados. Os resultados são mostrados na Tabela 1. O fator de aumento de barreira (BIF, *barrier improvement factor*) foi definido como a relação da taxa de transmissão de oxigênio do recipiente em poliéster com aditivo para a taxa de transmissão de oxigênio do recipiente em poliéster sem aditivo.

Tabela 1. Taxa de transmissão de oxigênio de recipientes de PET de 500 ml

Aditivo	Por cento em peso	IV (dl/g)	taxa de transmissão de O ₂ (cm ³ /pkg/dia)	BIF oxigênio	aspecto da garrafa
N/A	0	0,80	0,046	1,00	transparente
Cafeína	3	0,79	0,0306	1,5	transparente
Cafeína	5	0,77	0,0261	1,76	transparente

O BIF de oxigênio [fator de aumento de barreira de oxigênio] dos recipientes de 500 ml aumentou significativamente com a adição de cafeína à composição de PET, sem prejudicar a transparência ou IV dos recipientes.

Exemplo 2

Uma resina de classe de recipiente em poliéster comercialmente obtível (Voridian, Kingsport, Tennessee) foi preparada, moldada com injeção, e moldada com sopro como descrito no Exemplo 1. Uma pré-forma de 26,5 g de um recipiente de um recipiente de 20 oz (560 g).

As garrafas foram enchidas com gelo seco para se obter uma pressão interna de 56 psi [386 kPa]). A taxa de perda de CO₂ das garrafas foi medida a 22°C e 50 % de umidade relativa usando-se um método descrito pela Patente dos Estados Unidos nº 5.473.161, que é incorporada aqui integralmente por referência. Os resultados são mostrados na Tabela 2. O

fator de aumento de barreira (BIF) foi definido como a relação da perda de CO₂ do recipiente em poliéster sem aditivo, dividida pela taxa de perda de CO₂ do recipiente em poliéster em poliéster com aditivo. A vida-de-prateleira do refrigerante carbonatado simulado para cada recipiente também foi calculada como descrito pela Patente dos Estados Unidos nº 5.473.161.

Tabela 2. Perda de CO₂ de recipientes em PET de 20 oz (560 g)

Aditivo	Por cento em peso	Vida-de-prateleira do CO₂ (semanas)	BIF do CO₂
N/A	0	8,7	1,00
Cafeína	0,2	9,2	1,1
Cafeína	7,7	14,6	1,7
Cafeína	10	17,77	2,0

O BIF de dióxido de carbono dos recipientes em poliéster de 20 oz melhorou significativamente com a adição de cafeína à composição de PET, aumentando significativamente a vida-de-prateleira do dióxido de carbono vida-de-prateleira dos recipientes em poliéster.

Exemplo 3

Preparou-se uma resina de classe de recipiente em poliéster comercialmente obténível (Kosa, Spartanburg, South Carolina), que foi moldada com injeção, e moldada com sopro como descrito no Exemplo 1. Uma pré-forma de 21 g deu um recipiente de 12 oz (336 g). A taxa de perda de CO₂ das garrafas e a vida-de-prateleira do CO₂ foram determinadas como descrito no Exemplo 2. Os resultados são mostrados na Tabela 3.

Tabela 3. Perda de CO₂ de recipientes em PET de 12 oz (336 g)

Aditivo	Por cento em peso	Iv (dl/g)	Vida-de-prateleira do co₂ (semanas)	Bif do Co₂
N/A	0	0,77	8,9	1,0
Cafeína	1	0,77	10,4	1,2
Cafeína	3	0,75	12,2	1,4
Cafeína	5	0,77	13,8	1,6

O BIF do dióxido de carbono dos recipientes de 12 oz (336 g)

melhorou significativamente com a adição de cafeína à composição de PET, aumentando significativamente a vida-de-prateleira do dióxido de carbono dos recipientes sem prejudicar a IV dos recipientes.

Exemplo 4

5 Uma resina de classe de recipiente em poliéster comercialmente obtenível (Kosa, Spartanburg, South Carolina) foi combinada com cafeína (12 por cento em peso), pelletizada, e secada a 140°C. A mistura e PET seco, preparado como descrito no Exemplo 1, foram combinados dando um nível de carga de cafeína de 3 por cento em peso antes da
10 moldagem com injeção, como descrito no Exemplo 1, com um ajuste da temperatura do molde de 38°C para preparar pré-formas de 21 g aceitáveis. As pré-formas foram coletadas em momentos diferentes durante as operações de moldagem com injeção e cortadas ao meio de forma que as cores das pré-formas pudessem ser medidas com um colorímetro de laboratório Hunter. Os
15 resultados são mostrados na Tabela 4. Momento 0 representa a pré-forma de PET sem cafeína. O espaço de cor Hunter L*,a*,b* é um espaço de cor retangular tridimensional baseado na teoria de cores opostas e expandido na região do amarelo, em que no eixo L* (claridade branco é 100 e preto é 0, em que no eixo a* (vermelho-verde) vermelho é positivo, verde é negativo, e
20 neutro é 0; e em que no eixo b* (azul-amarelo) amarelo é positivo, azul é negativo, e neutro é 0. DE* é uma medida da diferença de cor total, calculada considerando-se a raiz quadrada da soma dos quadrados das alterações em L*,a*,b*.

Tabela 4. Cor da pré-forma de PET como uma função do tempo de operação
(h.)

Tempo	L*	a*	B*	Turbidez	DE*
0	79,38	-0,32	2,16	15,84	19,99
0,5	78,66	-0,66	3,38	11,71	20,43
1,5	78,76	-0,64	3,57	11,26	20,36
2,5	78,70	-0,68	3,47	11,27	20,40
3,5	78,55	-0,61	3,5	11,65	20,56
4,5	78,68	-0,60	3,32	11,69	20,40
5,5	78,70	-0,61	3,40	11,97	20,39

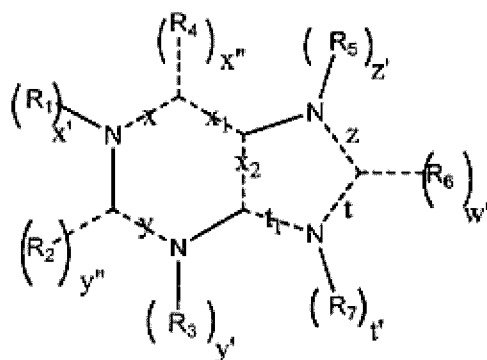
6,5	78,70	-0,59	3,33	11,96	20,39
7,5	78,89	-0,63	3,64	12,30	20,24
8,5	78,95	-0,61	3,26	12,01	20,12
9,5	78,96	-0,62	3,42	12,98	20,14
10,5	78,81	-0,62	3,31	12,47	20,27

Não há diferença significativa entre as cores das pré-formas em diferentes momentos de operação, indicando que a adição de cafeína à composição de PET não prejudica significativamente as qualidades da pré-forma em momentos diferentes.

- 5 Deveria-se compreender que o precedente refere-se apenas às concretizações preferidas da presente invenção e que é possível realizar numerosas alterações e modificações aqui sem afastar-se do espírito e escopo da invenção como definido pelas reivindicações a seguir e seus equivalentes.

REIVINDICAÇÕES

1. Recipiente de moldagem por sopro e estiramento, **caracterizado** pelo fato de que tem propriedades de barreira de gás aumentadas para acondicionar alimentos e bebidas preparados a partir de uma preforma moldada por injeção que compreende uma composição de poliéster compreendendo um poliéster e um derivado de purina, em que o derivado de purina compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula I



em que R_1 , R_3 , R_5 , e R_7 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, arilamino, alcóxi, arilóxi, alquenila, alquinila, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila;

em que t , t_1 , x , x_1 , x_2 , y , e z , independentemente um do outro, são uma ligação simples ou uma dupla ligação; em que t' , x' , y' , e z' , independentemente um do outro, são 0 ou 1; em que x'' , y'' , e w' , independentemente um do outro, são 1 ou 2;

em que quando x é uma dupla ligação, x_1 é uma ligação simples; em que quando x_1 é uma dupla ligação, x e x_2 são ligações simples; em que quando x_2 é uma dupla ligação, x_1 e t_1 são ligações simples; em que quando t é uma dupla ligação, t_1 e z são ligações simples; em que quando z é uma dupla ligação, t é uma ligação simples; em que quando t_1 é uma dupla ligação, t e x_2

são ligações simples; em que quando x é uma dupla ligação, x' é 0; em que quando x ou x_1 é uma dupla ligação, x'' é 1; em que quando y é uma dupla ligação, y' é 0 e y'' é 1; em que quando t ou t_1 é uma dupla ligação, t' é 0; em que quando z e t são ligações simples, w' é 2; em que quando z ou t é uma dupla
 5 ligação, w' é 1; em que quando z é uma dupla ligação, z' é 0; em que quando x , y , ou z , independentemente um do outro, é uma ligação simples, e x' , y' , ou z' , independentemente um do outro, é 1;

em que R_2 , R_4 , e R_6 , independentemente um do outro, podem ser porções ligadas por uma ligação simples ou uma dupla ligação;

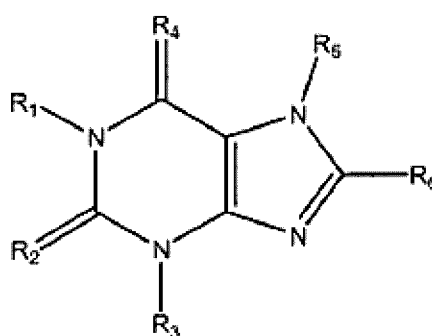
10 em que quando R_2 , R_4 , ou R_6 é uma porção ligada por uma ligação simples, R_2 , R_4 e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosforila, fosfino, tioéster,
 15 tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, herocíclico, ou acila;

em que quando R_2 , R_4 , ou R_6 é uma porção ligada por uma dupla ligação, R_2 , R_4 , ou R_6 , independentemente um do outro, compreendem oxigênio,
 20 enxofre, CR_8R_9 e SO_2 , ou NR_{10} ; R_8 e R_9 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido
 25 fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila; e R_{10} compreende um grupo hidrogênio, arilamino, alcóxi, arilóxi, alquenila, alquinila, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica,

alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila,

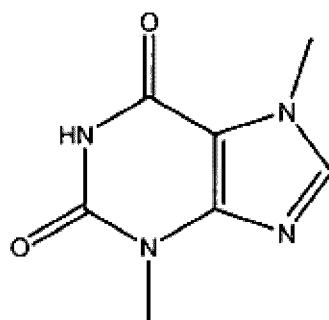
em que quando x'' é 2, ambas as porções R_2 podem ser iguais ou diferentes; em que quando y'' é 2, ambas as porções R_4 podem ser iguais ou diferentes; e em que quando w' é 2, ambas as porções R_6 podem ser iguais ou diferentes.

2. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula I compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula II



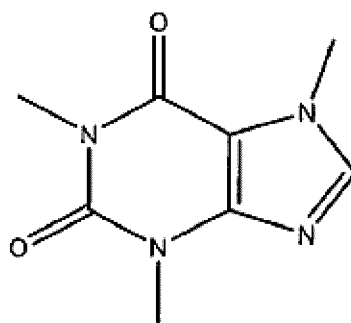
em que x , x_1 , y , e z são ligações simples; em que x_2 e t são duplas ligações; em que w' , x' , y' , z' , x'' , e y'' são 1; e em que t' é 0; em que R_2 e R_4 , independentemente um do outro, são porções ligadas por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_3 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfonila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

3. Recipiente de acordo com a reivindicação 2, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula II compreende teobromina, uma purina diona apresentando a estrutura química



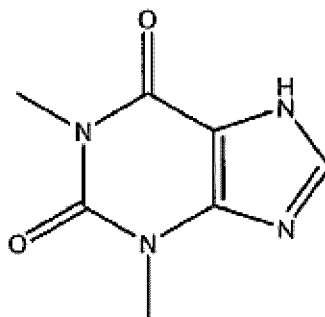
em que R_1 e R_6 são hidrogênio; em que R_2 e R_4 são oxigênio; e em que R_3 e R_5 são metila.

4. Recipiente de acordo com a reivindicação 2, **caracterizado**
 5 pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula II compreende cafeína, uma purina diona apresentando a estrutura química



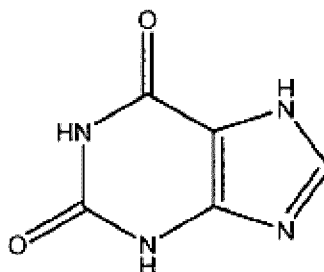
em que R_6 é hidrogênio; R_2 e R_4 são oxigênio; e R_1 , R_3 e R_5 são metila.

- 10 5. Recipiente de acordo com a reivindicação 2, **caracterizado**
 pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula II compreende teofilina, uma purina diona apresentando a estrutura química



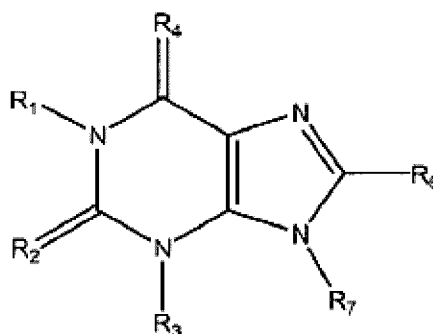
- 15 em que R_5 e R_6 são hidrogênio; em que R_2 e R_4 são oxigênio; e em que R_1 e R_3 e são metila.

6. Recipiente de acordo com a reivindicação 2, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula II compreende xantina, uma purina diona apresentando a estrutura química



em que R_1 , R_3 , R_5 e R_6 são hidrogênio; e R_2 e R_4 são oxigênio.

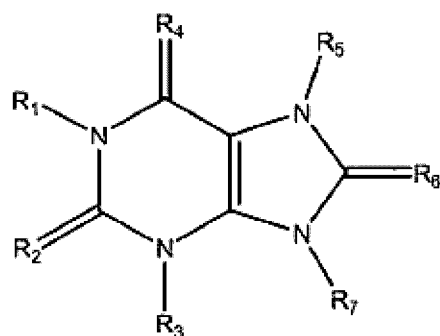
7. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula I compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula III



em que x , x_1 , y , e t , e t_1 são ligações simples; em que x_2 e z são duplas ligações; em que t' , w' , x' , y' , x'' , e y'' são 1; em que z' é 0; em que R_2 e R_4 , independentemente um do outro, são porções ligadas por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_3 , R_6 , e R_7 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoila, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um

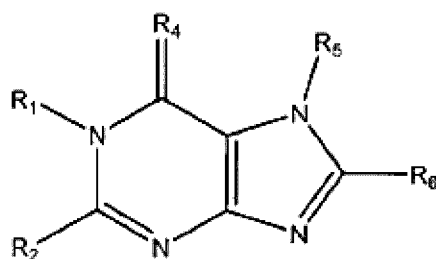
grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

8. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula I compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula IV



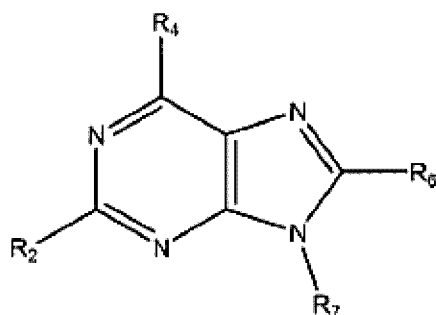
em que x, x₁, y, t, t₁, e z são ligações simples; em que x₂ é uma dupla ligação; em que t', w', x', y', z', x'', e y'' são 1; em que R₂, R₄, e R₆, independentemente um do outro, são porções ligadas por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR₈R₉, SO₂, ou NR₁₀; e em que R₁, R₃, R₅, e R₇, independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

9. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula I compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula V



em que x , x_1 , t_1 e z são ligações simples; em que e , x_2 , t , e y são duplas ligações;
 em que w' , x' , z' , x'' , e y'' são 1; em que y' e t' são 0; em que R_4 é uma porção
 ligada por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 ,
 5 ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_2 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro,
 compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino,
 arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato,
 mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoila, fosfonila, fosfinila,
 fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido
 10 fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada,
 ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

10. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado**
 pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula I compreende um composto
 apresentando a estrutura química da Fórmula VI

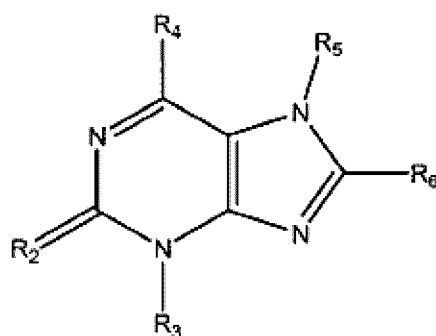


15

em que x , x_2 , y e z são duplas ligações; em que x_1 , t , e t_1 são ligações simples;
 em que t' , w' , x'' , e y'' são 1; em que x' e z' são 0; e em que R_2 , R_4 , R_6 , e R_7

compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido
 5 fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

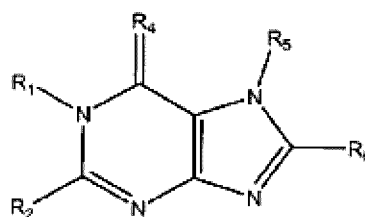
11. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula I compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula VII



em que x, x₂, e t são duplas ligações; em que t₁, x₁, y e z são ligações simples; em que w', y', z', x'', e y'' são 1; em que t' e x' são 0; em que R₂ é uma porção ligada por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR₈R₉, SO₂, ou NR₁₀; e em que R₃, R₄, R₅, e R₆, independentemente um do outro,
 15 compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoíla, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada,
 20 ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

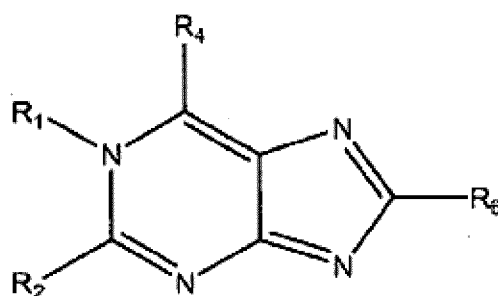
12. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula I compreende um composto

apresentando a estrutura química da Fórmula VIII



em que x_2 , y e t são duplas ligações; em que x , x_1 , t_1 , e z são ligações simples; em que w' , x' , z' , x'' , e y'' são 1; em que t' e y' são 0; em que R_4 é uma porção ligada por uma dupla ligação compreendendo oxigênio, enxofre, CR_8R_9 , SO_2 , ou NR_{10} ; e em que R_1 , R_2 , R_5 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila, alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoila, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

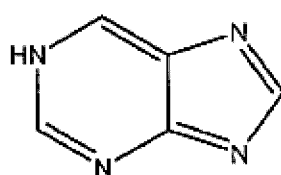
13. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula compreende um composto apresentando a estrutura química da Fórmula I



em que x_1 , y , t_1 , e z são duplas ligações; em que x , x_2 , e t são ligações simples; em que w' , x' , x'' , e y'' são 1; em que t' , y' , e z' são 0; e em que R_1 , R_2 , R_4 , e R_6 , independentemente um do outro, compreendem um grupo hidrogênio, hidroxila, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcóxi, arilóxi, nitro, acila, alquenila,

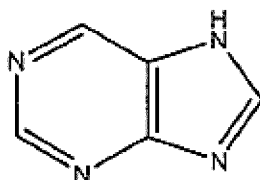
alquinila, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonila, sulfenila, sulfinila, sulfamoila, fosfonila, fosfinila, fosforila, fosfino, tioéster, tioéter, anidrido, oximino, hidrazino, carbamila, ácido fosfônico, fosfonato, ou um grupo alquila de cadeia reta, encadeada, ramificada, ou cíclica, alquenila, alquinila, arila, heteroarila, heterocíclico, ou acila.

14. Recipiente de acordo com a reivindicação 13, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula IX, compreende 1H-purina, apresentando a estrutura química



em que R_1 , R_2 , R_4 , e R_6 são hidrogênio.

15. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que o derivado de purina de Fórmula I compreende 7H-purina, apresentando a estrutura química



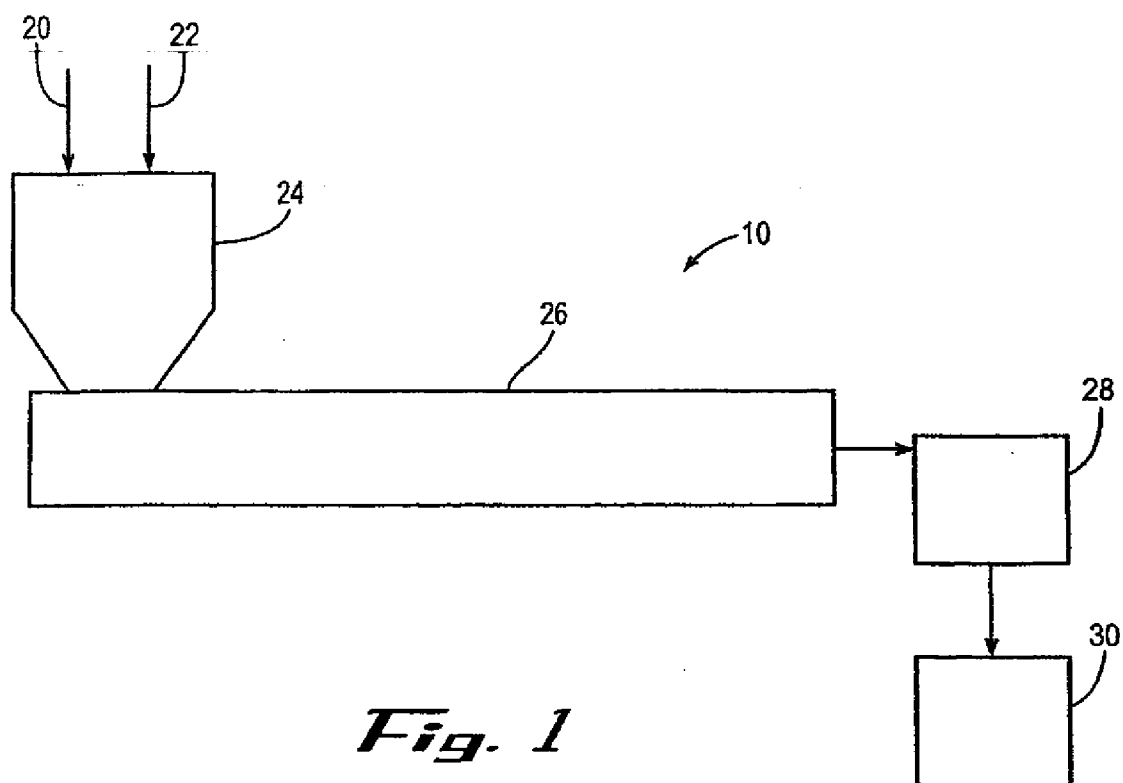
em que x , x_2 , y , e t são duplas ligações; em que x_1 , t_1 e z são ligações simples; em que x' , y' , e t' são 0; em que x'' , y'' , z' , e w' são 1; e em que R_2 , R_4 , R_5 , e R_6 são hidrogênio.

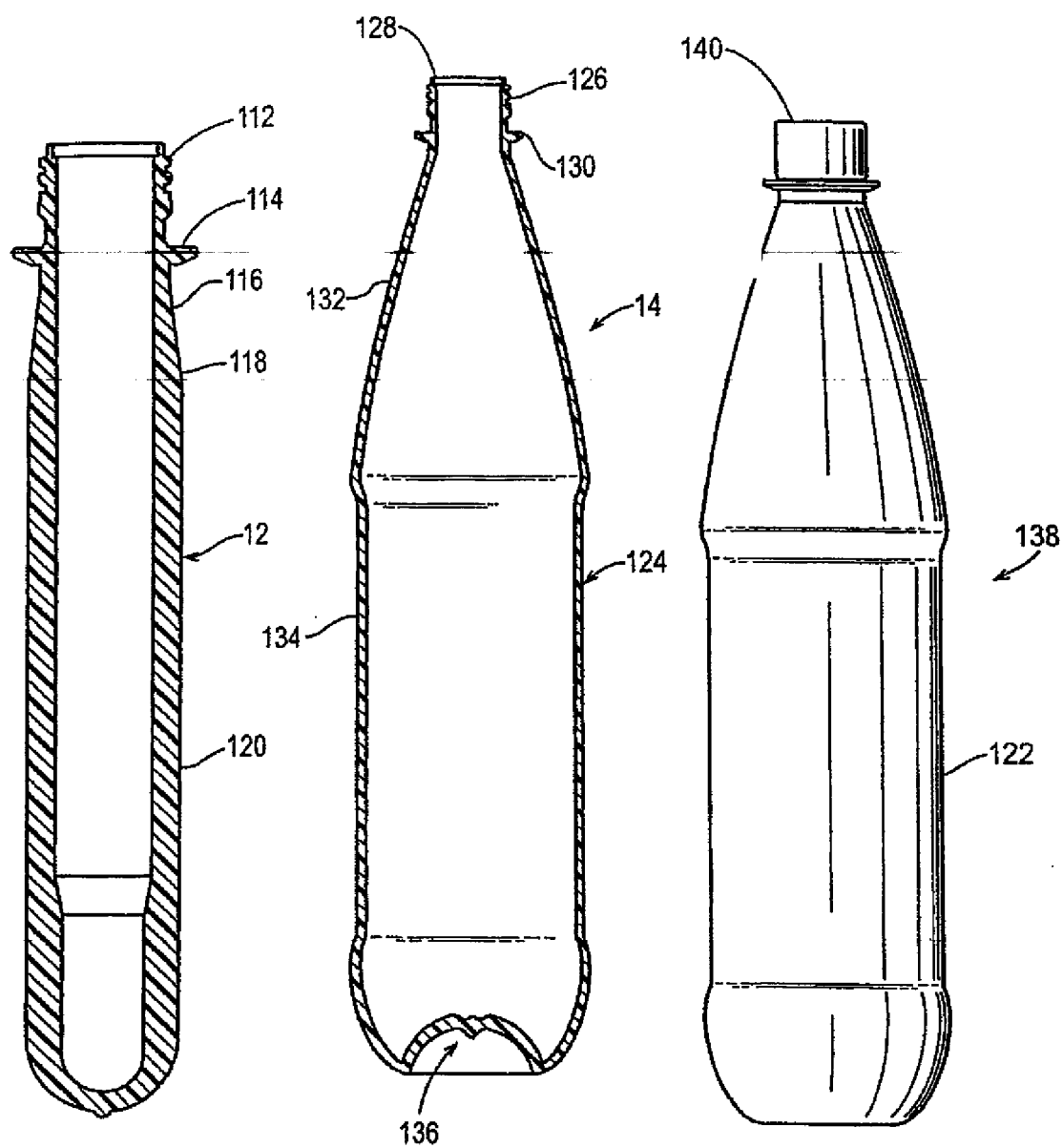
16. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que derivado de purina está presente na composição de poliéster numa quantidade na faixa de 0,2 a 10 por cento em peso da composição de poliéster.

17. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que o poliéster compreende poli(tereftalato de etileno).

18. Recipiente de acordo com a reivindicação 1, **caracterizado** pelo fato de que a composição de poliéster compreende um copolímero à base de poli(tereftalato de etileno) apresentando menos de 20 por cento de diácido, 10 por cento de modificação de glicol, ou ambos, baseado em 100 por cento em mol de componente diácido e 100 por cento em mol de componente diol.

19. Bebida acondicionada, **caracterizada** pelo fato de que compreende uma bebida disposta no recipiente de acordo com a reivindicação 1 e uma vedação para vedar uma bebida na embalagem.



*Fig. 2**Fig. 3**Fig. 4*