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

(11) **PI 0919143-7 B1**

(22) Data do Depósito: 29/09/2009

(45) Data de Concessão: 13/03/2018

(54) Título: MÉTODO PARA PRODUZIR PELO MENOS UM O-ARIL ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO, E, COMPOSIÇÃO PARA TRANSFERÊNCIA E ARMAZENAMENTO DE UM COMPOSTO TENDO UM GRUPO UREÍDO

(51) Int.Cl.: C07C 263/04; C07C 265/14; C07C 269/04; C07C 271/42

(30) Prioridade Unionista: 21/08/2009 JP 2009192250, 21/08/2009 JP 2009192268

(73) Titular(es): ASAHI KASEI CHEMICALS CORPORATION

(72) Inventor(es): NOBUHISA MIYAKE; MASAAKI SHINOHATA; ATSUSHI OKUBO

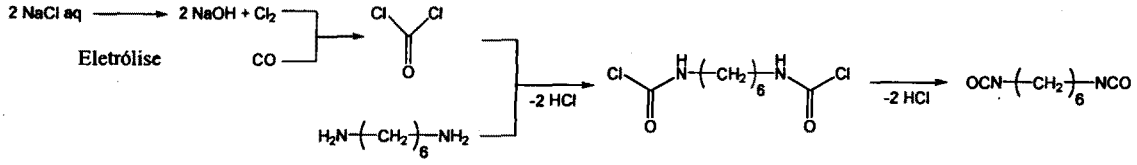
"MÉTODO PARA PRODUZIR PELO MENOS UM O-ARIL ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO, E, COMPOSIÇÃO PARA TRANSFERÊNCIA E ARMAZENAMENTO DE UM COMPOSTO TENDO UM GRUPO UREÍDO"

Campo Técnico

A presente invenção refere-se a um método para produzir éster de ácido carbâmico N-substituído e a um método para produzir isocianato que usa o éster de ácido carbâmico N-substituído.

Antecedentes da Invenção

Isocianatos são amplamente usados como matérias-primas de produção de tais produtos como espuma de poliuretano, tintas e adesivos. Embora uma pluralidade de mecanismos de reação possa ser considerada para produção industrial de isocianatos, o método de produção industrial principal envolve reação de uma amina com fosgênio (método de fosgênio) como indicado na seguinte fórmula (i), e quase a quantidade total de isocianatos produzidos em todo o mundo é produzida de acordo com o método de fosgênio. No entanto, o método de fosgênio apresenta numerosos problemas.



(i)

Primeiramente, este método requer o uso de uma grande quantidade de fosgênio como matéria prima. Fosgênio é extremamente tóxico e requer precauções de manuseio especiais para prevenir exposição de manipuladores dos mesmos, e também requer aparelhos especiais para detoxificar resíduo.

Em segundo lugar, uma vez que cloreto de hidrogênio altamente corrosivo é produzido em grandes quantidades como um subproduto do método de fosgênio, além de requerer um processo para detoxificar o cloreto de

hidrogênio, em muitos casos cloro hidrolítico está contido nos isocianatos produzidos, que podem ter um efeito prejudicial na resistência às condições metereológicas e resistência a calor de produtos de poliuretano no caso de usar isocianatos produzidos usando o método de fosgênio.

Na base nestes antecedentes, um método para produzir compostos de isocianato é procurado que não usa fosgênio.

Embora exemplos de tais métodos possam incluir um método para sintetizar isocianato alifático a partir de um composto nitro alifático e monóxido de carbono e um método para converter composto amida alifático em isocianato por decomposição de Hoffmann ambos métodos têm rendimento fraco e são inadequados para aplicação industrial.

Métodos para obter um isocianato e composto hidroxila por decomposição térmica de composto de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído são conhecidos há tempos, um exemplo sendo o método de A.W. Hoffmann (ver Documento não patente 1). Este método possibilita um rendimento elevado a ser conseguido mais facilmente que os métodos descritos acima, e a reação básica empregada neste método é indicada na seguinte fórmula (ii).

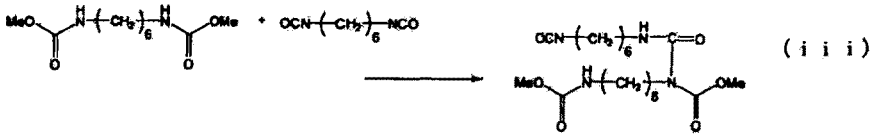


(ii)

Decomposição térmica representada pela fórmula geral acima é reversível, e embora o seu equilíbrio seja inclinado em direção ao O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído no lado esquerdo em baixas temperaturas, o lado direito com o isocianato e um lado de álcool são vantajosos em elevadas temperaturas. Deste modo, métodos para obter isocianato por decomposição térmica de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído são realizados em elevadas temperaturas (ver, por exemplo, Exemplos 12 e 13 de documento de patente 1). Aqui, embora dependente do grupo éster do O-alquil éster de ácido

carbâmico N-substituído, o ponto de ebulição de O-metil éster de ácido carbâmico N-substituído, por exemplo, é 110°C (durante pressão reduzida de cerca de 2 kPa) (linha 9 do topo da coluna da direita de documento não patente 2). Por outro lado, o ponto de ebulição de diisocianato de hexametileno, que é formado na reação correspondente de decomposição térmica, é 130 a 140°C (durante pressão reduzida de cerca de 2 kPa) (documento não patente 3). Isto é, isso indica que o O-metil éster de ácido carbâmico N-substituído tem um menor ponto de ebulição que o produto na forma de diisocianato de hexametileno. Embora os detalhes da temperatura de decomposição térmica do O-metil éster de ácido carbâmico N-substituído não sejam descritos, decomposição térmica prossegue a 200°C ou maior. No caso de realizar a reação de decomposição térmica na temperatura descrita de 250°C sob pressão reduzida, uma vez que estas condições excedem o ponto de ebulição do O-metil éster de ácido carbâmico N-substituído, a reação de decomposição térmica ocorre na fase gasosa. Uma vez que a matéria prima na forma do O-metil éster de ácido carbâmico N-substituído junto com o produto na forma de diisocianato de hexametileno bem como o subproduto na forma de metanol estão também presentes na fase gasosa, não apenas é difícil controlar a reação, como também ocorrem várias reações laterais irreversíveis. Como indicado na publicação acima citada por H. Schiff (documento não patente 4) e a pesquisa por E. Dyer e G.C. Wright (documento não patente 5), exemplos de tais reações laterais resultam na formação de uréias substituídas, biuretos, uretodionas, carbodiimidas e isocianuratos. No caso de decomposição térmica de fase gasosa de O-alquil ésteres de ácido carbâmico N-substituído, uma vez que as concentrações de ambos, o isocianato e O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído, são elevadas na fase gasosa, compostos alofanato formam facilmente como indicado pela seguinte fórmula (iii). Os pontos de ebulição destes compostos de alofanato são elevados uma vez que eles são formados por

uma reação de reticulação, e estes compostos alofanato liquefazem dentro do reator simultâneo à sua formação. Ademais, mesmo quando neste estado liquefeito, reticulação entre os alofanatos prossegue facilmente devido à decomposição térmica de grupos O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído. Deste modo, os alofanatos gradualmente solidificam resultando em entupimento do reator.



No caso de usar um O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído como uma matéria prima de uma reação de decomposição térmica, estas reações laterais não apenas causam diminuições em rendimento e seletividade do isocianato alvo, mas também induzem a formação de polímeros durante a produção de poliisocianato em particular, e dependendo do caso, podem causar uma situação que torna difícil a operação de longo prazo, tal como levando o reator a ser entupido por precipitação de sólidos poliméricos.

Além disso, pesquisa tem sido há tempos conduzida sobre métodos para produzir O-alquil ésteres de ácido carbâmico N-substituído como descrito acima. O método descrito em documento de patente 2 contém a produção de O-alquil éster de ácido carbâmico alifático sem usar fosgênio. No primeiro estágio deste método, um O-alquil éster de ácido carbâmico alifático é produzido a partir de uma amina primária alifática e uréia reagindo N,N'-dialquil uréia e um composto hidróxi, após que a amina primária formada como um subproduto é isolada, recuperada e retornada ao primeiro estágio. Uma vez que este método não apenas tem um baixo rendimento de éster de ácido carbâmico formado, mas também requer equipamento para reciclar a amina primária, o processo é extremamente complexo e não é satisfatório para aplicação industrial.

Métodos usando uréia ou derivado de ácido carbônico (como éster de ácido carbônico ou éster de ácido carbâmico) foram propostos como métodos alternativos para produzir O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído.

O método descrito em documento de patente 3 contém reagir uma diamina primária e álcool com uréia ou derivado de ácido carbônico na presença de um catalisador seguido por conversão para O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído. No método descrito em documento de patente 4, O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído é produzido após primeiro produzindo bis-uréia a partir de amina primária alifática, uréia e álcool, enquanto o método descrito em documento de patente 5 envolve a reação parcial de uréia e álcool em uma primeira etapa, seguido por fornecer diamina para produzir O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído em uma segunda etapa. Documento de patente 6 descreve um método para obter O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo uma amina primária e O-alquil éster de ácido carbâmico não N-substituído na presença de álcool em uma razão de grupos NH_2 para carbamato para álcool de 1:0,8 a 10,0:0,25 a 50, em uma temperatura a partir de 160 a 300°C e na presença ou ausência de um catalisador, e então removendo a amônia formada como necessário. O método descrito em documento de patente 7, diisocianato e/ou poliisocianato aromático são produzidos passando através das duas etapas seguintes. Na primeira etapa, uma amina primária aromática e O-alquil éster de ácido carbâmico não N-substituído são reagidos na presença ou ausência de um catalisador e na presença ou ausência de uréia e álcool para obter O-alquil éster de ácido N-aril carbâmico enquanto removendo a amônia formada como um subproduto como necessário, enquanto na segunda etapa, o O-alquil éster de ácido N-aril carbâmico é submetido à decomposição térmica para obter isocianato aromático. O método descrito em documento de patente 8 contém produzir

O-alquil éster de ácido carbâmico de N-aquila após primeiro produzir bis-uréia a partir de uma poliamina primária alifática, uréia e álcool. Documento de patente 9 descreve um método para produzir O-alquil monouretano alifático reagindo uma amina primária alifática e uréia com um álcool alifático.

No entanto, como foi previamente descrito, estas reações de decomposição térmica para produzir isocianatos a partir de O-alquil ésteres de ácido carbâmico N-substituído requerem temperaturas elevadas, e causam a formação de compostos poliméricos atribuíveis às reações laterais indesejáveis como indicado em, por exemplo, a fórmula mencionada acima (iii).

A maioria de reações laterais indesejáveis ocorre facilmente em temperaturas mais elevadas. Além disso, isocianatos formados em reação de decomposição térmicas tendem a aumentar a maior duração de contato com o O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído não reagido e outros componentes de reação (incluindo aqueles em que uma porção dos ésteres de ácido carbâmico tornaram-se grupos isocianato no caso da matéria prima de reação de decomposição térmica ser um poli (O-alquil éster de ácido carbâmico (N-substituído)). Vários métodos foram propostos para obter um rendimento de isocianato favorável para inibir a formação de produtos de reações laterais indesejáveis durante decomposição térmica de O-alquil ésteres de ácido carbâmico N-substituído.

Entre os O-ésteres de ácido carbâmico N-substituído (O-ésteres de ácido carbâmico N-substituído referem-se a ésteres de ácido carbâmico contendo um grupo ácido carbâmico e um grupo orgânico, e na explicação da presente invenção, indicam O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído, em que o grupo orgânico é derivado de um grupo hidróxi aromático e/ou O-alquil ésteres de ácido carbâmico N-substituído em que o grupo orgânico é derivado de um álcool), O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído, em que o grupo éster que compõe o O-éster de ácido carbâmico N-substituído é um grupo

aromático (isto é, grupo éster de ácido carbâmico derivado de um grupo hidróxi aromático) oferecem a vantagem de permitir a configuração de uma temperatura inferior para a reação de decomposição térmica como comparado com O-alquil ésteres de ácido carbâmico N-substituído, em que o grupo éster é um grupo alquila (ver, por exemplo, documento de patente 10). Em outras palavras, os produtos laterais de reação indesejável mencionados acima podem ser inibidos caso fosse possível fixar a temperatura de decomposição térmica em uma temperatura baixa.

Por outro lado, a produção de tais O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído é mais difícil que a produção de O-alquil ésteres de ácido carbâmico N-substituído. Isso é causado pelas reatividades do álcool e do composto hidróxi aromático usados como matérias primas de suas respectivas reações de esterificação. A primeira razão para isso é que compostos hidróxi aromático têm menor nucleofilicidade que os álcoois. A segunda razão é que a reação de esterificação prossegue com dificuldade devido à natureza fracamente acídica de compostos hidróxi aromático.

Documento de Patente 11 descreve um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído alifático sem usar fosgênio. Neste método, O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é produzido oxidativamente usando um catalisador de metal precioso de uma amina primária, monóxido de carbono e um álcool alifático ou composto hidróxi aromático. No entanto, este método tem os problemas de um procedimento complexo e custos consideráveis. Estes problemas referem-se ao uso de monóxido de carbono altamente tóxico, e a necessidade para recuperar o catalisador a partir do produto na forma de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído devido ao uso de um catalisador de metal precioso caro. Documento de patente 12 descreve um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo uma N-alquil-N,N'-dialquil uréia, um

composto hidróxi aromático e gás cloreto de hidrogênio. No entanto, este método também tem um procedimento complicado e requer custos consideráveis. Isto é, este método usa gás cloreto de hidrogênio corrosivo, consome um composto de uréia caro e incomum, e resulta em dificuldade em recuperar o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir de um cloridrato de N,N'-dialquilamina formado como um subproduto. No método descrito em documento de patente 13, O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é produzido por uma reação de um estágio entre uréia, composto hidróxi aromático e amina primária alifática. No método descrito em documento de patente 14, uréia e um composto hidróxi aromático são reagidos em uma primeira etapa, e O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é produzido reagindo com amina primária em uma subsequente segunda etapa.

Tecnologias também foram descritas para melhorar a baixa nucleofilicidade de compostos hidróxi aromático e a dificuldade em deslocar o equilíbrio dos mesmos. Documento de patente 15 e documento de patente 16 descrevem métodos para produzir O-aril uretano alifático a partir de uma reação de etapa simples de uréia e/ou O-aril carbamato (O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído), composto hidróxi aromático e amina primária alifática. Nestes métodos, uma melhora considerável é alcançada com relação à remoção de amônia, tal como usando destilação reativa ou um método para introduzir uma grande quantidade de gás inerte. Documento de patente 17 descreve um método para continuamente produzir uretano cnquanto continuamente fornecendo uma poliamina primária, uréia e/ou éster de ácido carbâmico não N-substituído e composto hidróxi orgânico a uma coluna de reação para formar o uretano correspondente e continuamente extraindo amônia formada dentro da coluna de reação da coluna de reação. Por outro lado, documento de patente 18 descreve um método que não usa um composto hidróxi aromático modestamente nucleofílico como descrito acima. Este

método permite um correspondente O-aril éster de ácido N-alquil carbâmico ser obtido em um rendimento de 90 a 95% reagindo uma alquil amina primária com um carbonato de diarila na presença de um solvente tal como benzeno, dioxano ou tetracloreto de carbono. Este método tem a vantagem de permitir a obtenção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em uma baixa temperatura bem como com uma seletividade elevada. No entanto, é correntemente difícil aplicar este método industrialmente devido ao elevado custo do carbonato de diarila.

No caso de métodos usando matérias primas seguras e baratas na forma de derivados de ácido carbônico e uréia, é necessário usar um excesso de derivado de ácido carbônico e uréia com base no grupo amino da amina primária a fim de melhorar o rendimento com base na amina primária comparativamente cara. No entanto, isso não significa que estes métodos inibiram com sucesso reações laterais ou melhoraram a seletividade com relação à amina primária.

O método descrito em documento de patente 19 contém recuperar O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído a partir de um líquido de reação resultante e reciclar para uso como uma matéria prima da reação quando produzindo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo uma poliamina primária alifática, composto hidróxi aromático, uréia e/ou O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído. Isto é, este método serve para reduzir a quantidade usada da uréia e/ou O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído. Neste método, após obter um composto hidróxi aromático e ácido isociânico por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído contido no líquido de reação, e destilando o composto hidróxi aromático em uma baixa temperatura, o ácido isociânico é novamente reagido com o composto hidróxi aromático destilado e recuperado na forma de O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído. No entanto, em adição a este

método tendo um procedimento complexo, a taxa de recuperação do O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído é insatisfatória.

Desta maneira, um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído usando uréia ou derivado de ácido carbônico de modo segura que satisfaz as quantidades de uréia ou derivado de ácido carbônico e amina primária deve ainda ser descrito. Isso é devido à baixa nucleofilicidade de compostos hidróxi aromático como previamente descrito bem como a baixa cationicidade dos carbonos carbonila de uréia e derivado de ácido carbônico.

Apesar dos problemas mencionados acima, uma vez que seria extremamente industrialmente útil obter isocianatos sem usar fosgênio, vários métodos foram propostos para melhorar os métodos para produzir isocianatos usando O-ésteres de ácido carbâmico N-substituído em adição aos descritos acima. Existem métodos que são realizados em uma fase gasosa em elevadas temperaturas bem como métodos que são realizados em uma fase líquida sob condições de temperatura comparativamente baixa. Como foi previamente descrito, entretanto, uma vez que existem casos em que reações laterais ocorrem durante o curso de decomposição térmica de O-alquil ésteres de ácido carbâmico N-substituído resultando na formação de precipitados, substâncias poliméricas e obstruções no reator e aparelho de recuperação ou a formação de substâncias aderidas às paredes de reator, eficiência econômica é baixa no caso de produzir isocianatos durante um período prolongado de tempo. Deste modo, embora, por exemplo, o uso de métodos químicos tal como o uso de um catalisador especial (ver documento de patente 20 ou documento de patente 21), ou um catalisador em combinação com um solvente inerte (ver documento de patente 22) ter sido proposto para melhorar o rendimento durante a decomposição térmica de O-alquil ésteres de ácido carbâmico N-substituído, problemas encontrados durante a produção de O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído ainda precisam ser resolvidos. Por exemplo, o método descrito

em documento de patente 23 é um método para produzir diisocianato de hexametileno. Este método contém decomposição térmica de O-etil éster de ácido dicarbâmico de hexametileno na presença de uma mistura de catalisador contendo sulfonato de metil tolueno e dicloreto de difenil estanho enquanto usando dibenzil tolueno como um solvente. No entanto, produção e isolamento dos componentes iniciais bem como purificação e recuperação arbitrária do solvente e mistura de catalisador não são descritos em detalhes, e a eficiência econômica deste método é extremamente baixa.

No método descrito em documento de patente 24, O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído é facilmente decompostos para isocianato e álcool em um leito fluidizado contendo carbono sem usar um catalisador. No entanto, o rendimento de isocianato obtido na reação de decomposição térmica é de cerca de 83,8 a 98,7%, e embora subprodutos de reação e semelhantes não estejam descritos, uma vez que O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído é ainda submetido à decomposição térmica e os compostos resultantes contêm isocianato e álcool que são suscetíveis à ocorrência de reações reversas na mesma maneira como na técnica anterior, as reações laterais mencionadas acima não podem ser ditas como sendo inibidas. No método em documento de patente 25, descreve-se um método circulante para produzir um diisocianato alicíclico reagindo um diamina primária alicíclica, uréia e álcool para obter um O-alquil éster de ácido dicarbâmico alicíclico, seguido por submeter o O-alquil éster de ácido dicarbâmico alicíclico a decomposição térmica. Este método alcança sucesso em reduzir as quantidades de materiais usados recuperando álcool não reagido, O-éster de ácido carbâmico não N-substituído e carbonatos de dialquila, e recircular uma porção da mistura de reação da etapa de decomposição térmica junto com subprodutos para a etapa inicial. No entanto, este método requer o O-alquil éster de ácido dicarbâmico alicíclico a ser destilado em uma temperatura elevada de cerca de 230°C para remover resíduo

não apto a ser usado no método de produção. Uma vez que esta temperatura de destilação elevada está dentro da faixa de temperatura em que O-alquil ésteres de ácido carbâmico passam por decomposição térmica, grupos isocianato formados durante destilação acabam reagindo com o O-alquil éster de ácido dicarbâmico alicíclico resultando na possibilidade de formação de polímeros sólidos. Embora seja descrito nos exemplos que rendimento é mantido durante um longo período de operação, não há descrição com relação à presença de acúmulo de polímeros ou entupimento do aparelho devido à ocorrência de reações colaterais.

Além disso, o método descrito em documento de patente 26 envolve parcialmente remover subprodutos desprezíveis antes de decomposição térmica de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído. Neste método, entretanto, uma vez que O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído é também removido junto com os subprodutos parcialmente removidos, o rendimento de isocianato com base em amina primária e derivado de ácido carbônico é ultimamente diminuído. Além disso, compostos poliméricos são formados como um resultado de subprodutos permanecendo no reator sem ser descarregados do reator sendo aquecido, e uma vez que estes compostos aderiram ao reator, operação contínua durante um longo período de tempo é difícil.

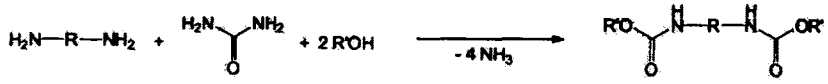
Em reações para obter O-(alquil ou aril) ésteres de ácido carbâmico N-substituído reagindo uréia e derivado de ácido carbônico (ou derivado de ácido carbâmico) com uma amina primária e álcool ou composto hidróxi aromático, uréia e derivado de ácido carbônico (ou derivado de ácido carbâmico) são usados em excesso para melhorar a seletividade da amina primária cara.

Uma fórmula de reação de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído no caso de usar uma amina primária e uréia como matérias

primas é mostrada na seguinte fórmula (iv). Embora uma quantidade adequada de uréia esteja presente com base na amina primária na fase inicial da reação, à medida que a reação entra na última fase, as concentrações de ambos (amina primária e uréia) diminuem resultando no O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído estando presente e uma elevada concentração. Como foi previamente descrito, a cationicidade de uréia e carbonos carbonila de derivados de ácido carbônico é baixa (devido a aceitar a doação de elétron por grupos NH_2 e grupos alcóxi) e a diferença em reatividade entre carbonos carbonila do produto na forma de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído e a amina primária é pequena. Deste modo, a menos que a quantidade de uréia esteja presente em excesso com base na amina primária, a reação prossegue como indicado por fórmula (v) durante a última fase da reação. Isto é, a amina primária reage com o produto na forma de O-(alquil ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído levando a estar desnaturada para um composto tendo ligações de uréia N,N-di-substituída não desejáveis. No caso de usar poliamina, uma vez que cada grupo amino reage sucessivamente, várias formas desnaturadas são formadas além daquela mostrada na seguinte fórmula (v). Além disso, reações também ocorrem tal como aquela baseada na seguinte fórmula (vii) envolvendo reação com isocianato formado de acordo com a seguinte fórmula (vi), e pode ser facilmente presumido com base em um conhecimento de química orgânica e taxas de reação que como o O-(alquil ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído acumula-se e a concentração de uréia diminui, a formação destes produtos de desnaturação aumenta dramaticamente. Substâncias polimerizadas de elevado peso molecular são naturalmente adicionalmente formadas com base nos princípios das fórmulas (v), (vi) e (vii). Uma vez que compostos tendo ligações de uréia N,N-di-substituída formadas devido a esta desnaturação têm níveis baixos de reatividade, adicionar novamente álcool dissociado torna-se difícil. Embora tais

reações ocorram em elevadas temperaturas, uma vez que a formação de isocianatos por decomposição térmica de O-(alquil ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído também começa a ocorrer em elevadas temperaturas, isto resulta na ocorrência de uma faixa diversa de reações colaterais.

(Reação inicial)



(iv)

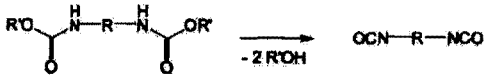
(Reação posterior: reação com O-(alquil ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído)



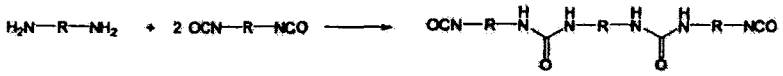
(v)

(Reação posterior: reação com isocianato)

Formação de isocianato



(vi)



(vii)

Uma vez que as substâncias poliméricas formadas com base nas reações acima mencionadas têm solubilidade extremamente baixa em solventes e outros, elas frequentemente aderem e solidificam no reator, assim tornando tais métodos industrialmente insatisfatórios. Em resposta a tais problemas, embora métodos tenham sido examinados (ver documento de patente 4) para produzir O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído produzindo bis-uréia de amina primária, uréia e álcool e então reagindo a bis-uréia com álcool como previamente descrito, estes métodos são objetivados em reação com um álcool altamente nucleofílico e não são realizados para resolver o problema em decomposição térmica do O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído, assim prevenindo tais métodos de resolver os problemas que ocorrem durante a decomposição térmica de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído

como descrito acima. Além disso, embora um método para produzir bis-uréia tenha sido proposto envolvendo a reação de uréia fundida e amina na ausência de um solvente (ver, por exemplo, Documento não patente 6), devido à temperatura de fusão elevada de uréia (cerca de 135°C), existem muitos casos em que a reação prossegue não uniformemente resultando na ocorrência de reações de desnaturação de uréia e reações resultando na formação de compostos tendo ligações de uréia N,N-di-substituída, assim impedido que os problemas acima mencionados sejam resolvidos.

Além disso, um método para purificar tais substâncias poliméricas por cristalização foi também desenvolvido (documento de Patente 27). Neste método também, é difícil cristalizar seletivamente compostos tendo estruturas similares em rendimento elevado, enquanto, por outro lado, energia é gasta para separar sólidos e líquidos bem como recuperar o solvente de cristalização.

Documentos da Técnica Anterior

Documento de Patentes

Documento de Patente 1 : Patente US No. 7122697

Documento de Patente 2 : Patente US No. 2677698

Documento de Patente 3 : Patente US No. 4713476

Documento de Patente 4 : Pedido EP No. 0568782

Documento de Patente 5 : Pedido EP No. 0657420

Documento de Patente 6 : Patente US No. 4497963

Documento de Patente 7 : Patente US No. 4290970

Documento de Patente 8 : Pedido de Patente Japonesa acessível ao público No. H6-41045

Documento de Patente 9 : Patente US No. 2,409,701

Documento de Patente 10 : Patente US No. 3992430

Documento de Patente 11 : Patente US No. 4297501

Documento de Patente 12 : Patente US No. 3873553

Documento de Patente 13 : Patente US No. 4925971

Documento de Patente 14 : Pedido de Patente Japonesa acessível ao público No. H4-164060

Documento de Patente 15 : Pedido de Patente Japonesa acessível ao público No. H2-759

Documento de Patente 16 : Pedido de Patente Japonesa acessível ao público No. H3-20254

Documento de Patente 17 : Pedido de Patente Japonesa acessível ao público No. H8-277255

Documento de Patente 18 : Pedido de Patente Japonesa acessível ao público No. S52-71443

Documento de Patente 19 : Pedido de Patente Japonesa acessível ao público No. H7-157463

Documento de Patente 20 : Patente US No. 2692275

Documento de Patente 21 : Patente US No. 3734941

Documento de Patente 22 : Patente US No. 4081472

Documento de Patente 23 : Patente US No. 4388426

Documento de Patente 24 : Patente US No. 4482499

Documento de Patente 25 : Pedido EP No. 0355443

Documento de Patente 26 : Patente Japonesa No. 3382289

Documento de Patente 27 : Patente Japonesa No. 2804132

Documentos não patente

Documento não patente 1 : Berchte der Deutechen Chemischen Gesellschaft, Vol. 3, p. 653, 1870

Documento não patente 2 : Journal of American Chemical Society, Vol. 73, p. 1831, 1951, linha 9 do topo da coluna da direita

Documento não patente 3 : Journal of American Chemical Society, Perkin Transactions 1: Organic and Bio-organic chemistry (1972-1999), pp.

141-143, 1976

Documento não patente 4 : Berchte der Deutechen Chemischen Gesellschaft, Vol. 3, p. 649, 1870

Documento não patente 5 : Journal of American Chemical Society, Vol. 81, p. 2138, 1959

Documento não patente 6 : Polimer, Vol. 35, p. 3766, 1994

Descrição da Invenção

Problemas a serem resolvidos pela invenção

Como foi descrito acima, mesmo com qualquer um dos métodos examinados até agora, é ainda difícil obter O-(alquil ou aril) ésteres de ácido carbâmico N-substituído em rendimento elevado usando uréia e O-ésteres de ácido carbâmico não N-substituído como matérias primas, e geralmente os produtos de reação dos mesmos incluem compostos tendo ligações de uréia (-NHCONH-), compostos tendo terminações de uréia ($-NHCONH_2$), compostos tendo terminações de grupo amino ($-NH_2$) ou compostos tendo ligações alofanato e semelhantes em aproximadamente todos os casos. Em métodos usando a matéria prima menos cara e mais segura na forma de uréia, o problema de inibir aumentos nas quantidades de uréia e amina primária usadas causadas por suas reações laterais deve ser ainda resolvido, e uma alternativa ao método de fosgênio ainda precisa ser conseguida devido ao entupimento e outros problemas relacionados ao processo bem como o custo elevado de produção de isocianatos.

Desta maneira, numerosos problemas envolvendo a produção de precursores de isocianato na forma de O-(alquil ou aril) ésteres de ácido carbâmico N-substituído ainda permanecem, e há uma necessidade urgente para resolver tais problemas.

Como foi previamente descrito, vários métodos foram propostos como métodos para produzir O-(alquil ou aril) éster de ácido carbâmico

N-substituído usando uréia ou derivados de ácido carbônico. Isocianatos correspondentes são conhecidos como estando aptos a serem obtidos por decomposição térmica de O-(alquil ou aril) ésteres de ácido carbâmico N-substituído.

No entanto, no caso de usar um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído como um precursor, o isocianato formado e a matéria prima na forma do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagem devido à temperatura elevada de decomposição térmica resultando em suscetibilidade aumentada para ocorrência de desnaturação. Além disso, na reação de decomposição térmica, ambos, álcool e isocianato, estão presentes na fase gasosa. Uma vez que a reação entre álcool e isocianato é rápida, uma reação ocorre em que o isocianato retorna a O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por uma reação reversa na fase gasosa, assim resultando em suscetibilidade aumentada para a ocorrência de entupimento de linhas tais como a linha para extrair isocianato do reator.

Por outro lado, no caso de usar um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído como um precursor, problemas ocorrem com a produção do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Isso é devido à baixa nucleofilicidade de compostos hidróxi aromático e a dificuldade em aumentar seletividade de reação para o O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído a partir de aminas primárias. A causa da diminuição em seletividade é a taxa de esterificação lenta e as taxas de reação de outras reações laterais indesejáveis sendo mais rápidas do que a esterificação devido à nucleofilicidade lenta de compostos hidróxi aromático.

Também, os métodos descritos requerem o uso de um excesso de uréia ou derivado de ácido carbônico com base nos grupos amino da amina primária a fim de melhorar o rendimento com base na amina primária cara comparativa. No entanto, um método para eficientemente recuperar e reutilizar

o uréia ou derivado de ácido carbônico de excesso deve ser ainda descrito, e aumentos em unidades básicas de uréia ou derivado de ácido carbônico são incapazes de serem evitados.

Os inventores da presente invenção previamente descreveram um método para inibir reações de desnaturação térmica de O-alquil ésteres de ácido carbâmico N-substituído usando um composto hidróxi aromático específico como uma solvente de reação (Publicação de Patente Internacional WO 2008/120645), e também descreveram um método para melhorar a estabilidade térmica de compostos hidróxi aromático tendo uma quantidade de traço de um derivado de ácido carbônico presente durante a decomposição térmica de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído, que é obtido reagindo éster de ácido carbônico e amina primária, na presença de um composto hidróxi aromático (Publicação de Patente Internacional WO 2008/084824).

Como um resultado de estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, foi claramente determinado que quando uma quantidade especificada ou mais de uréia ou derivado de ácido carbônico está presente no líquido de reação de um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido usando uréia ou derivado de ácido carbônico, a aderência e/ou acúmulo de sólidos insolúveis presumidos como sendo reagentes do derivado de ácido carbônico e/ou uréia e isocianato são observados durante o curso de obtenção do isocianato por decomposição térmica do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, assim resultando no potencial de causar problemas incluindo os relacionados à operação de longo prazo de equipamento de produção.

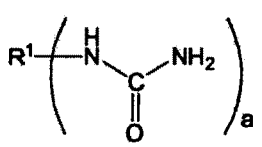
Um objeto da presente invenção é prover um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído que é livre dos vários problemas descritos acima, e prover um método para produzir isocianato por decomposição térmica do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído.

Em vista do acima, como um resultado de conduzir estudos

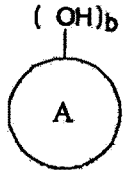
extensivos sobre os problemas mencionados acima, os inventores da presente invenção verificaram que os problemas são resolvidos obtendo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado de um composto tendo grupos ureído e um composto hidróxi aromático a partir do composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático específica, e produzindo isocianato submetendo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído à decomposição térmica, assim conduzindo à conclusão da presente invenção.

Isto é, em um primeiro aspecto da mesma, a presente invenção provê:

[1] um método para produzir pelo menos um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (em que O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído refere-se a um éster de ácido carbâmico N-substituído em que átomos de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) são ligados a um anel aromático) derivado de um composto tendo um grupo ureído representado pela seguinte fórmula (1) e uma composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2), o método compreendendo a etapa de realizar esterificação ou esterificação e transesterificação a partir do composto tendo o grupo ureído e a composição de hidróxi aromático:



(1)



(2)

(em que

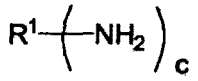
R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número a de grupo(s) ureído, e o a representa um inteiro de 1 a 10, e

anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo

aromático substituído por número b de grupo(s) hidróxi em local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas, e que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e pode ser substituído por outros substituintes, e o b representa um inteiro de 1 a 6).

[2] O método de produção de acordo com o item [1] acima, em que composto tendo o grupo ureído é um composto tendo um grupo ureído obtido por um processo compreendendo a seguinte etapa A:

etapa (A): uma etapa de obter pelo menos um tipo de composto tendo um grupo ureído derivado de uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (3) e uréia por ureidação da amina primária orgânica e a uréia em uma fase líquida e eliminando ou extraindo para uma fase gasosa a amônia formada como um subproduto na reação de ureidação:



(3)

(em que

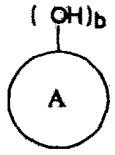
R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número c de grupo(s) NH_2, e o c representa um inteiro de 1 a 10).

[3] O método de produção de acordo com o item [2] acima, em que a amina primária orgânica é uma monoamina primária orgânica ou uma diamina primária orgânica.

[4] O método de produção de acordo com o item [2] acima, em que a etapa (A) é realizada na presença de água e/ou álcool e/ou uma composição hidroxila aromática contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático.

[5] O método de produção de acordo com o item [2], em que a

etapa (A) é realizada na presença de uma composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2):



(2)

(em que

anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo aromático substituído por número b de grupo(s) hidróxi em um local(s) arbitrário que mantém propriedades aromáticas, que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e pode ser substituído por outros substituintes, e o b representa um inteiro de 1 a 6).

[6] O método de produção de acordo com o item [2], em que a etapa (A) é realizada na presença de um álcool representado pela seguinte fórmula (4):

$$R^2OH \quad (4)$$

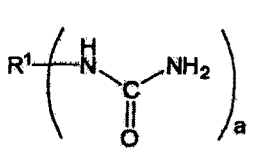
(em que

R^2 representa um grupo alifático, ou um grupo alifático em que um grupo aromático é ligado, que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 14, e o grupo OH do álcool representado por fórmula (4) é um grupo OH que não é ligado a um anel aromático).

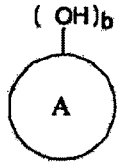
Além disso, em um segundo aspecto da mesma, a presente invenção provê:

[7] Uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo um grupo ureído, em que o número de moléculas de pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte

fórmula (2) em uma composição de hidróxi aromático que contém o composto hidróxi aromático, com base no número do grupo ureído contido no composto tendo o grupo ureído representado pela seguinte fórmula (1) na composição, é um inteiro de 1 a 100:



(1)



(2)

(em que

R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número a de grupo(s) ureído, e o a representa um inteiro de 1 a 10), e

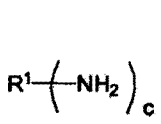
anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo aromático substituído por número b de grupo(s) hidróxi em local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas, e que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e pode ser substituído por outros substituintes, e o b representa um inteiro de 1 a 6).

[8] O método de produção de acordo com o item [1] acima, ainda compreendendo as seguintes etapas (A) e (B):

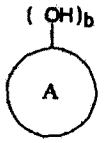
etapa (A): uma etapa de obter pelo menos um tipo de composto tendo um grupo ureído derivado de uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (3) e uréia por ureidação da amina primária orgânica e a uréia em uma fase líquida e eliminando ou extraindo para uma fase gasosa a amônia formada como um subproduto na reação de ureidação, e

etapa (B): uma etapa de obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo o pelo menos um tipo de composto tendo o grupo ureído e a composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de

composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2) em uma fase líquida, e extraindo amônia formada como um subproduto para uma fase gasosa:



(3)



(2)

(em que

R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número c de grupo(s) NH_2, e o c representa um inteiro de 1 a 10, e

anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo aromático substituído por número b de grupo(s) hidróxi em local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas, e que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e pode ser substituído por outros substituintes, e o b representa um inteiro de 1 a 6).

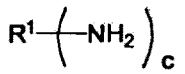
[9] O método de produção de acordo com o item [1] acima, ainda compreendendo as seguintes etapas (A), (R) e (P):

etapa (A): uma etapa de obter pelo menos um tipo de composto tendo um grupo ureído derivado de uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (3) e uréia por ureidação da amina primária orgânica e da uréia em uma fase líquida e eliminando ou extraindo para uma fase gasosa a amônia formada como um subproduto na reação de ureidação,

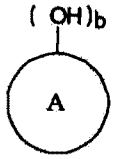
etapa (R): uma etapa de obter O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo o pelo menos um tipo de composto tendo o grupo ureído e um álcool representado pela seguinte fórmula (4) em uma fase líquida e extraindo amônia formada como um subproduto para fase gasosa (em que o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representa um éster de ácido

carbâmico N-substituído em que átomos de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) são ligados a um grupo R^2 derivado de um álcool), e

etapa (P): uma etapa de obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e a composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2) em uma fase líquida e extraindo álcool formado como um subproduto para uma fase gasosa:



(3)



(2)

R^2OH (4)

(em que

R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número c de grupo(s) NH_2, e o c representa um inteiro de 1 a 10,

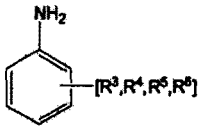
anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo aromático substituído por número b de grupo(s) hidróxi em local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas, e que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e pode ser substituído por outros substituintes, e o b representa um inteiro de 1 a 6, e

R^2 representa um grupo alifático, ou um grupo alifático em que um grupo aromático é ligado, que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 14, e o grupo OH do álcool representado por fórmula (4) é um grupo OH que não é ligado a um anel aromático).

[10] O método de produção de acordo com o item [8] ou [9] acima, em que a amina primária orgânica é uma monoamina primária orgânica

aromática representada pela seguinte fórmula (5), uma etapa (C) seguinte é realizada após a etapa (B), após a etapa (R) ou após a etapa (P), e O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com um grupo metileno (-CH_2-), é obtido a partir do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído obtido na etapa (B), na etapa (R) ou na etapa (P):

etapa (C): uma etapa de obter O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com um grupo metileno (-CH_2-), reagindo o O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com formaldeído ou um agente de reticulação metilenante e grupos aromáticos de reticulação derivados da monoamina primária orgânica aromática contida no O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com o grupo metileno (-CH_2-)(em que o O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído representa um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído ou um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído):



(5)

(em que

pelo menos um local na posição orto e/ou posição para do grupo NH_2 de uma monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) não é substituída, grupos R^3 a R^6 respectivamente representam um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel, grupos R^3 a R^6 podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^3 a R^6 podem juntos ligar-se para formar um anel com um anel aromático, grupos R^3 a R^6 são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre o grupo consistindo de grupos em que um grupo

selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono de grupos R^3 a R^6 é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e um número total de átomos de carbono que compõe a monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) é um inteiro de 6 a 13).

[11] O método de produção de acordo com o item [8] ou [9] acima, compreendendo a etapa de recuperar uréia realizando a seguinte etapa (D) antes da etapa (B) ou da etapa (P) e/ou simultâneo à etapa (B) ou a etapa (P):

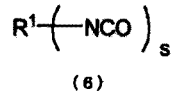
etapa (D): uma etapa de remover uréia por destilação ou sublimação.

[12] O método de produção de acordo com o item [8] ou [9] acima, compreendendo a seguinte etapa (E) de reciclar a uréia recuperada à etapa (A):

etapa (E): uma etapa de reciclar uréia recuperada em etapa (D) para etapa (A).

[13] O método de produção de acordo com o item [1] acima, compreendendo a etapa de obter um isocianato representado pela seguinte fórmula (6), que é derivado do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, e uma composição de hidróxi aromático realizando decomposição térmica no O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído na etapa (F) seguinte:

etapa (F): uma etapa de obter um isocianato e uma composição de hidróxi aromático a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído:



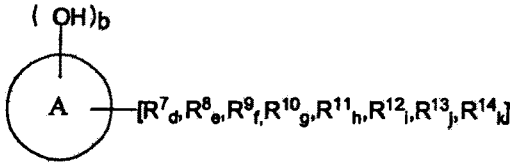
(6)

(em que

R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número s de grupo(s) NCO, e o s representa um inteiro de 1 a 10).

[14] O método de produção de acordo com o item [8] ou [9] acima, compreendendo a etapa de separar a composição de hidróxi aromático obtida na etapa (F) a partir do isocianato, e reciclar a composição de hidróxi aromático na etapa (A) e/ou na etapa (B), ou na etapa (A) e/ou na etapa (R) e/ou na etapa (P).

[15] O método de produção de acordo com qualquer um de itens [1], [8] e [9], em que um composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático é pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (7):



(7)

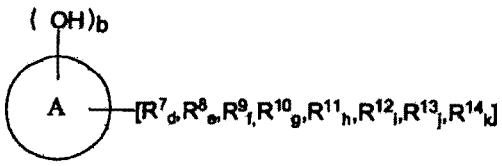
(em que

anel A representa um anel aromático selecionado dentre um anel benzeno, um anel naftaleno e um anel antraceno, os grupos OH e grupos R^7 a R^{14} respectivamente representam grupos substituídos em local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas de anel A, grupos R^7 a R^{14} podem respectivamente e independentemente substituir anel A, grupos R^7 a R^{14} podem ligar-se juntos para formar um anel com um anel aromático por ligação ao anel A, grupos R^7 a R^{14} respectivamente e independentemente representam um átomo de hidrogênio, um átomo de halogênio ou um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila, um grupo arila tendo um grupo hidróxi, um grupo aralquila e um grupo éter (grupo alquil éter substituído e/ou não substituído e/ou aril éter substituído e/ou não substituído e/ou aralquil éter substituído e/ou não substituído), e/ou um grupo ao qual um ou mais tipos de grupos selecionados dentre o grupo são ligados, e/ou um grupo ao qual um ou mais tipos de grupos selecionados dentre

o grupo são ligados por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, e anel A e grupos R^7 a R^{14} são compostos de um número total integral de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50,

b representa um inteiro de 1 a 6, d, e, f, g, h, i, j e k representam inteiros a partir de 0 a 5, o valor de d + e + f + g + h + i + j + k representa um inteiro igual a 6-b no caso anel A é o anel benzeno, representa um inteiro igual a 8-b no caso anel A é o anel naftaleno, ou representa um inteiro igual a 10-b no caso anel A é o anel antraceno, e um grupo selecionado dentre grupos R^7 a R^{14} como descrito acima podem ser ciclicamente ligados um anel A por ligações carbono-carbono e/ou ligações de éter).

[16] A composição para transferência e armazenamento do composto tendo o grupo ureído de acordo com o item [7] acima, em que composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático é pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (7):



(7)

(em que

anel A representa um anel aromático selecionado dentre um anel benzeno, um anel naftaleno e um anel antraceno, os grupos OH e grupos R^7 a R^{14} respectivamente representam grupos substituídos em local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas de anel A, grupos R^7 a R^{14} podem respectivamente e independentemente substituir anel A, grupos R^7 a R^{14} podem ligar-se juntos para formar um anel com um anel aromático por ligação ao anel A, grupos R^7 a R^{14} respectivamente e independentemente representam um átomo de hidrogênio, átomo de halogênio ou grupo selecionado dentre o grupo

consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila, um grupo arila tendo um grupo hidróxi, um grupo aralquila e um grupo éter (grupo alquil éter substituído e/ou não substituído e/ou aril éter substituído e/ou não substituído e/ou aralquil éter substituído e/ou não substituído), e/ou um grupo ao qual um ou mais tipos de grupos selecionados dentre o grupo são ligados, e/ou um grupo ao qual um ou mais tipos de grupos selecionados dentre o grupo são ligados por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, e anel A e grupos R^7 a R^{14} são compostos de um número total integral de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50,

b representa um inteiro de 1 a 6, d, e, f, g, h, i, j e k representam inteiros a partir de 0 a 5, o valor de d + e + f + g + h + i + j + k representa um inteiro igual a 6-b no caso anel A é o anel benzeno, representa um inteiro igual a 8-b no caso anel A é o anel naftaleno, ou representa um inteiro igual a 10-b no caso anel A é o anel antraceno, e um grupo selecionado dentre grupos R^7 a R^{14} como descrito acima podem ser ciclicamente ligados um anel A por ligações carbono-carbono e/ou ligações de éter).

[17] O método de produção de acordo com qualquer um de itens [2], [8] e [9], em que composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático tem um ponto de ebulição padrão que difere por 10°C ou mais a partir do ponto de ebulição padrão de um isocianato tendo uma estrutura em que todos grupos amino da amina primária orgânica (grupos amino primários) são convertidos em grupos isocianato.

[18] O método de produção de acordo com qualquer um de itens [1], [8] e [9], em que composto hidróxi aromático contido na composição de hidróxi aromático é um composto hidróxi aromático monovalente e/ou divalente (isto é, aquele em que b é 1 e/ou 2).

[19] A composição para transferência e armazenamento do composto tendo o grupo ureído de acordo com o item [7] acima, em que

composto hidróxi aromático contido na composição de hidróxi aromático é um composto hidróxi aromático monovalente e/ou divalente (isto é, aquele em que b é 1 e/ou 2).

[20] O método de produção de acordo com o item [18] acima, compreendendo reciclar O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído não reagido que não foi termicamente decomposto na etapa (F), na etapa (A) e/ou na etapa (B) e/ou na etapa (R) e/ou na etapa (P) e/ou na etapa (F).

[21] O método de produção de acordo com o item [8] ou [9] acima, ainda compreendendo a seguinte etapa (G) de recuperar amônia formada como um subproduto na etapa (A) e/ou na etapa (B) e/ou na etapa (R); regenerar uréia reagindo a amônia com dióxido de carbono; e reciclar a uréia à etapa (A):

etapa (G): uma etapa de recuperar amônia formada como um subproduto, regenerar uréia reagindo a amônia com dióxido de carbono, e reciclar a uréia para etapa (A)

Efeitos Vantajosos da Invenção

De acordo com o método de produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído da presente forma de realização, produzindo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir de um composto tendo um grupo ureído e uma composição de hidróxi aromático, inibindo reações laterais e eficientemente recuperando e reutilizando uréia e semelhantes usados em excesso na reação, O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído pode ser produzido sem quaisquer perdas nas quantidades de uréia e de amina primária orgânica usadas. Além disso, uma vez que vários produtos de reação laterais podem ser inibidos e os vários produtos de reação laterais podem ser dissolvidos por um composto hidróxi aromático e removidos para fora do sistema, operação é possível durante um longo período de tempo. Ademais, a composição para transferência e armazenamento de um composto tendo um grupo ureído pode ser preferivelmente usada como uma matéria prima para

produção do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído.

Breve Descrição dos Desenhos

FIG. 1 mostra um desenho conceitual descrevendo um método de produção de um composto tendo o grupo(s) ureído de acordo com a etapa (A) na presente forma de realização;

FIG. 2 mostra um desenho conceitual descrevendo a etapa (B) na presente forma de realização;

FIG. 3 mostra um desenho conceitual descrevendo a etapa (R) na presente forma de realização;

FIG. 4 mostra um desenho conceitual descrevendo a etapa (P) na presente forma de realização;

FIG. 5 mostra um desenho conceitual descrevendo a etapa (P) na presente forma de realização;

FIG. 6 mostra um desenho conceitual descrevendo a etapa (P) na presente forma de realização;

FIG. 7 mostra um desenho conceitual descrevendo um método de produção de éster de ácido carbâmico N-substituído que usa uma composição de hidróxi aromático contendo um composto hidróxi aromático ativo e um composto hidróxi aromático inativo na presente forma de realização;

FIG. 8 mostra um desenho conceitual descrevendo um aspecto da presente forma de realização que combina uma via 1) com etapas (D), (E), (F) e (G);

FIG. 9 mostra um desenho conceitual descrevendo um aspecto da presente forma de realização que combina uma via 2) com etapas (D), (E), (F) e (G);

FIG. 10 mostra um desenho conceitual descrevendo um aspecto da presente forma de realização que combina uma via 3) com etapas (D), (E), (F) e (G);

FIG. 11 mostra um desenho conceitual descrevendo um aspecto da presente forma de realização que combina uma via 4) com etapas (D), (E), (F) e (G);

FIG. 12 mostra um desenho conceitual descrevendo um aspecto da presente forma de realização que combina uma via 5) com etapas (D), (E), (F) e (G);

FIG. 13 mostra um desenho conceitual descrevendo um aparelho de produção de éster de ácido carbâmico N-substituído em um exemplo da presente forma de realização;

FIG. 14 mostra um desenho conceitual descrevendo um aparelho de produção de éster de ácido carbâmico N-substituído em um exemplo da presente forma de realização;

FIG. 15 mostra um desenho conceitual descrevendo um aparelho de produção de éster de ácido carbâmico N-substituído em um exemplo da presente forma de realização;

FIG. 16 mostra um desenho conceitual descrevendo um aparelho de reação de transesterificação em um exemplo da presente forma de realização;

FIG. 17 mostra um desenho conceitual descrevendo um aparelho de produção de isocianato em um exemplo da presente forma de realização;

FIG. 18 mostra um desenho conceitual descrevendo um aparelho de produção de isocianato em um exemplo da presente forma de realização;

FIG. 19 mostra um desenho conceitual descrevendo um aparelho para produzir um composto tendo grupos ureído em um exemplo da presente forma de realização;

FIG. 20 mostra um desenho conceitual descrevendo um aparelho de produção de éster de ácido carbâmico N-substituído em um exemplo comparativo da presente forma de realização;

FIG. 21 mostra um desenho conceitual descrevendo um aparelho de produção de éster de ácido carbâmico N-substituído em um exemplo da presente forma de realização;

FIG. 22 mostra um desenho conceitual descrevendo um aparelho de produção de uréia em um exemplo da presente forma de realização;

FIG. 23 mostra o espectro de ^{1}H-RMN de uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo os grupos ureído de exemplo 97 da presente forma de realização;

FIG. 24 mostra o espectro de ^{1}H-RMN de uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo os grupos ureído de exemplo 106 da presente forma de realização;

FIG. 25 mostra o espectro de ^{1}H-RMN de uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo os grupos ureído de exemplo 122 da presente forma de realização; e

FIG. 26 mostra o espectro de ^{1}H-RMN de uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo os grupos ureído de exemplo 142 da presente forma de realização.

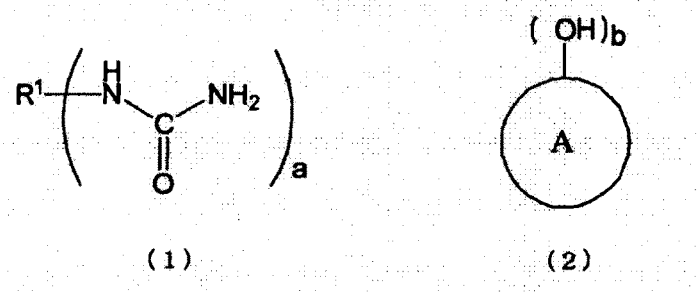
Modo de Realizar a Invenção

O seguinte apresenta uma explicação detalhada do melhor modo de realizar a presente invenção (a ser referido como "presente forma de realização"). Além disso, a presente invenção não é limitada à seguinte presente forma de realização, mas ao contrário pode ser modificada de várias formas dentro do escopo da essência da mesma.

Uma explicação é dada primeiro de uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído na presente forma de realização. Para começar, uma explicação é dada das razões de compósitos e assim por diante de compostos contidos na composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído, e é

seguido por uma explicação detalhada de compostos contidos na composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído.

A composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído na presente forma de realização refere-se a uma composição para transferir e armazenar compostos tendo grupos ureído, em que o número de moléculas de um composto hidróxi aromático em uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2)) com base no número de grupos ureído contidos em um composto tendo grupos ureído representados pela seguinte fórmula (1) na composição é um inteiro de 1 a 100:



(1) (2)

(em que,

R^1 representa um grupo orgânico que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, e que é substituído por um número de grupos ureído, e a representa um inteiro de 1 a 10, e

anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo aromático substituído por número b de grupos hidróxi em locais arbitrários que mantém propriedades aromáticas, e que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e pode ser substituído por outros substituintes, e b representa um inteiro de 1 a 6).

Detalhes do composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) e o composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) serão

subsequentemente explicados.

Uma vez que o composto tendo grupos ureído usados na presente forma de realização facilmente forma ligações de hidrogênio entre moléculas do mesmo devido aos grupos ureído que compõe o composto tendo grupos ureído, existem muitos casos em que ele tem um elevado ponto de fusão. Em transferência de tal composto tendo grupos ureído, transferência é realizada por, por exemplo, esmagando um composto sólido tendo grupos ureído ou modelando tal como por formação em grânulos. Alternativamente, métodos são também empregados em que o composto tendo grupos ureído é aquecido a uma temperatura maior que o ponto de fusão da mesma para transferir o composto tendo os grupos ureído na forma de um líquido. No entanto, no caso de transferir um composto sólido tendo grupos ureído que passou por processamento de conformação, ocorrem casos em que isso causa entupimento da linha de transferência uma vez que há variação considerável no formato do composto tendo grupos ureído. Consequentemente existem muitos casos em que aparelhos complicados são requeridos para estavelmente transferir uma quantidade fixa de composto tendo os grupos ureído ou uma etapa é requerida para alinhar o formato do composto tendo grupos ureído dentro de certa faixa. Por outro lado, no caso de aquecer um composto tendo os grupos ureído e transferir na forma de um líquido, é necessário aquecer o composto tendo os grupos ureído a uma temperatura maior que o ponto de fusão dos mesmos (por exemplo, 150°C) em consideração de prevenir solidificação durante transferência. No caso de manter o composto tendo os grupos ureído sob tais elevadas temperaturas, ocorrem frequentemente casos em que isocianato pode ser formado em locais indesejáveis devido à ocorrência de uma reação de decomposição térmica do composto tendo os grupos ureído ou a ocorrência de uma reação de desnaturação térmica do composto tendo os grupos ureído. A composição da presente forma de realização demonstra o efeito de estar apta a

manter a estabilidade do composto tendo os grupos ureído inibindo desnaturação térmica do composto tendo os grupos ureído na composição durante transferência ou armazenamento da composição. Embora o mecanismo por qual o efeito de inibir desnaturação térmica do composto tendo os grupos ureído é demonstrado não é evidente, os inventores da presente invenção presumiram que, como um resultado do composto hidróxi aromático que compõe a composição formar um estado em que ligações uretano têm dificuldade em aproximar-se devido à formação de ligações de hidrogênio entre ligações ureído ($-NHCONH_2$) do composto tendo os grupos ureído e o composto hidróxi aromático fracamente acídico, é difícil para uma reação ocorrer que forma compostos tendo grupos ureileno (-NHCONH-).

Além disso, grupos ureileno (-NHCONH-) podem ser referidos como grupos ureína na explicação da presente forma de realização.

A composição para transferência e armazenamento pode ser preferivelmente usada na produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em particular (embora o termo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é usado frequentemente nas seguintes explicações, o termo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído refere-se a um éster de ácido carbâmico N-substituído em que átomos de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) são ligados a um anel aromático, o anel aromático referindo-se a um anel aromático em que um grupo é ligado a um grupo aromático, referido grupo sendo selecionado dentre o grupo consistindo de grupos aromáticos e/ou grupos alifáticos, e o anel aromático sendo formado ligando referido grupo de números inteiros de pelo menos 0 com o grupo aromático, os detalhes dos quais serão subsequentemente descritos). Mais especificamente, o método contém transferir a composição para transferência e armazenamento para uma etapa de síntese de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, aplicando um composto tendo grupos ureído contidos na composição para uma reação de

esterificação, e recuperar o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído formado. Em geral, uma etapa de síntese de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é realizada em uma temperatura elevada, e se compostos tendo os grupos ureído são alimentados em um estado de ter ligações de hidrogênio entre moléculas dos mesmos, desnaturação para compostos tendo grupos ureileno termicamente estável é termicamente vantajosa. Um composto tendo grupos ureileno é uma forma condensada do composto tendo grupos ureído e é um composto de peso molecular elevado. Deste modo, existem muitos casos em que problemas ocorrem devido à formação de polímeros que aderem ou solidificam no reator. Além disso, existem muitos casos em que o composto tendo os grupos ureído contém compostos tais como amônia ou uréia. Estes compostos, e particularmente uréia, frequentemente passa por decomposição térmica em ácido isociânico e amônia na faixa de temperatura de síntese da etapa de síntese de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, e quando o ácido isociânico reage com o composto tendo grupos ureído, eles são desnaturados para compostos tendo ligações biureto. Os compostos tendo ligações biureto têm uma temperatura de decomposição térmica elevada, e apresentam dificuldades em formas O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído devido a reagir com compostos hidróxi aromático. No entanto, os inventores da presente invenção encontram que desnaturação de compostos tendo grupos ureído durante transferência e armazenamento da composição para transferência e armazenamento é inibida mesmo se a composição para transferência e armazenamento contém quantidades específicas desta amônia e uréia. Este efeito é particularmente notável durante armazenamento de longo prazo, e existem muitos casos em que desnaturação não está apta a ser confirmada mesmo durante avaliação acelerada e teste. Esta descoberta não era até agora conhecida e é surpreendente. Embora o mecanismo pelo qual este efeito é demonstrado não esteja claro, os inventores da presente invenção

imaginaram que, durante transferência e armazenamento da composição, o composto hidróxi aromático inibe desnaturação de compostos de amônia e uréia ou semelhantes e os compostos tendo os grupos ureído aprisionando água e oxigênio presentes em quantidade de traços, e quando produzindo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído usando esta composição, o composto hidróxi aromático também funciona como um catalisador de esterificação do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído.

Na composição para transferência e armazenamento, a razão do número de moléculas (y) do composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático para o número de grupos ureído (x) que compõe (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído está dentro de uma faixa de 1 a 100. Embora y está preferivelmente em excesso com base em x no caso de assumir o mecanismo descrito acima, por outro lado, em consideração da eficiência de transferência do composto tendo os grupos ureído e o tamanho do tanque de armazenamento durante armazenamento, a razão de y para x está preferivelmente dentro de uma faixa maior que 2 mas menor que 50, e mais preferivelmente dentro de uma faixa maior que 3 mas menor que 20.

Na composição para transferência e armazenamento, o composto tendo os grupos ureído contidos na composição é preferivelmente um composto tendo grupos ureído que é obtido reagindo uma amina primária orgânica, uréia e/ou derivado de ácido carbônico (a ser subsequentemente explicado em detalhes) e/ou ácido isociânico e/ou ácido carbâmico não N-substituído. Em consideração de facilidade de aquisição industrial, o composto tendo os grupos ureído é mais preferivelmente um composto tendo grupos ureído que é obtido reagindo uma amina primária orgânica e uréia.

A composição para transferência e armazenamento pode também conter componentes diferentes do composto tendo os grupos ureído e o composto hidróxi aromático. Exemplos de tais componentes podem incluir a

amônia acima mencionada, uréia, derivado de ácido carbônico (o derivado de ácido carbônico indicado na presente forma de realização será subsequentemente explicado em detalhe), ácido carbâmico não N-substituído, composto tendo uma ligação de biureto, composto tendo um grupo ureileno, água, álcool, gás inerte (tal como gás nitrogênio, gás dióxido de carbono, gás argônio ou gás amônia) e O-éster de ácido carbâmico N-substituído tal como O-(alquil ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído obtido reagindo a composição para transferência e armazenamento com uma composição de hidróxi aromático (a ser subsequentemente explicado em detalhes). Embora não existam limitações particulares nas quantidades em que estes componentes estão contidos, se reações laterais desnecessárias parecem ocorrer atribuíveis a temperatura de armazenamento e semelhantes, as quantidades desta são preferivelmente ajustadas conforme a ocasião demanda. Componentes particularmente notáveis são oxigênio, amônia, água, substâncias oxidantes e substâncias redutoras. Existem muitos casos em que a composição para transferência e armazenamento contém compostos contendo átomos de nitrogênio, ou a composição de hidróxi aromático pode ser desnaturada como um resultado de ser oxidada por oxigênio resultando na ocorrência de fenômenos tais como coloração. Além disso, uma vez que a composição torna-se uma composição inflamável em quase todos os casos, gás oxigênio deve ser administrado usando métodos conhecidos da mesma maneira como armazenamento comum de substâncias químicas orgânicas efetuadas neste campo técnico. Por exemplo, a concentração de fase gasosa oxigênio em um tanque de armazenamento é controlada purgando com nitrogênio de modo que a concentração de oxigênio é 10% ou menos, preferivelmente 1% ou menos e mais preferivelmente 100 ppm ou menos. No caso de deixar um gás inerte tal como nitrogênio fluir através da fase gasosa, a concentração de oxigênio do gás de inserção é controlada para 10 ppm ou menos. A concentração de amônia

dissolvida na composição é controlada para 1% em peso ou menos e preferivelmente para 0,1% em peso ou menos. O método de controle pode ser um método conhecido tal como purgando a fase líquida com um gás inerte tal como gás nitrogênio. Uma vez que existem casos em que grandes quantidades de água podem causar fenômenos que impedem a composição de ser uniforme, a concentração de água na composição é 10% em peso ou menos e preferivelmente 1% em peso ou menos, embora dependente dos componentes da composição, e no caso de usar a composição como uma matéria prima de um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, a concentração de água é mais preferivelmente 100 ppm ou menos uma vez que uma quantidade grande de água presente podem causar reações laterais atribuíveis à água. A concentração de água pode ser controlada por um método conhecido tal como o uso de um agente de desidratação ou dessecante, destilando sob uma pressão reduzida, uma pressão aumentada ou uma pressão normal, ou purgando uma fase líquida com um gás inerte para remover a água junto com o gás inerte. Uma vez que a presença de uma substância oxidante ou substância de redução pode causar desnaturação do composto hidróxi aromático, estas substâncias são controladas usando um método conhecido para controlar compostos hidróxi aromático. Substâncias oxidantes referem-se a ácidos de Bronsted tais como ácidos orgânicos ou ácidos inorgânicos e ácidos de Lewis, enquanto substâncias redutoras referem-se a bases de Bronsted tais como bases orgânicas ou bases inorgânicas, bases de Lewis e gás hidrogênio. Substâncias redutoras não incluem compostos derivados da composição, tais como a amônia acima mencionada, uréia, derivado de ácido carbônico ou compostos que compõe a composição (por exemplo, O-ésteres de ácido carbâmico N-substituído tais como O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído ou O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído (o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído será subsequentemente descrito

em detalhe)). Embora não existam limitações particulares no teor de O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído (o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído será subsequentemente descrito em detalhes) obtido em um processo para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir da composição para transferência e armazenamento e uma composição de hidróxi aromático (a ser subsequentemente descrita em detalhes), uma vez que existem casos em que o composto tendo os grupos ureído e o O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído reage durante armazenamento resultando na formação de composto hidroxilado desalcoolizado ou des-aromático que condensa formando ligações ureileno, a quantidade deste baseada no composto tendo os grupos ureído contidos na composição para transferência e armazenamento é controlada a 10 equivalentes molares ou menos e preferivelmente 1 equivalente molar ou menos. Exemplos de outros componentes que podem estar contidos podem incluir uréia e álcool. Não existem limitações particulares nos teores de quaisquer destes componentes. A composição para transferência e armazenamento pode estar na forma de uma pasta fluida ou sólido. Está preferivelmente na forma de uma pasta fluida e mais preferivelmente na forma de um líquido. Uma vez que uréia tende a solidificar facilmente, em consideração de fluidez, é controlada para 20 equivalentes molares ou menos e preferivelmente 10 equivalentes molares ou menos com base no composto tendo os grupos ureído contidos na composição para transferência e armazenamento. Embora não existam também limitações em álcool, elas podem ser controladas correspondendo à necessidade de destilar álcool depois da transferência. Por exemplo, a quantidade de álcool é controlada a 100 equivalentes molares ou menos e preferivelmente 10 equivalentes molares ou menos com base no composto tendo os grupos ureído contidos na composição para transferência e armazenamento.

Embora o termo O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico

N-substituído seja frequentemente usado no presente relatório, ele refere-se a um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído ou O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído.

Embora não existam limitações particulares nas condições para armazenamento e transferência da composição, existem condições em que uma reação de decomposição térmica do composto tendo os grupos ureído ocorre extremamente facilmente em elevadas temperaturas. Embora variando de acordo com o período de armazenamento, armazenamento é realizado dentro de uma faixa de -40 a 280°C, e em casos em que fluidez e estabilidade são prejudicados, preferivelmente a 0 a 260°C e mais preferivelmente a 40 a 260°C. A temperatura de armazenamento pode ser controlada correspondendo à aplicação da composição, o período de armazenamento e a facilidade de manipulação da composição. Embora transferência seja também realizada em uma temperatura dentro da faixa de temperatura durante armazenamento, quando usando a composição como uma matéria prima de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, e quando transferindo para a etapa de síntese de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, transferência pode ser realizada após confirmar que transferência pode ser realizada seguramente de acordo com as condições da etapa de reação e o equipamento usado na etapa de reação uma vez que transferência para o reator da etapa de síntese é tipicamente realizada após pré-aquecer para a temperatura de reação. Geralmente, transferência é realizada dentro de uma faixa de -40 a 280°C, e em casos em que fluidez e estabilidade são prejudicadas, é preferivelmente realizada a 0 a 260°C e mais preferivelmente a 40 a 260°C. Transferência pode ser controlada dependendo da aplicação da composição, tempo de transferência e facilidade de manipulação da composição como previamente descrito. Embora não existam limitações particulares em pressão durante transferência, armazenamento pode ser realizado sob condições de uma pressão reduzida para condições de uma

pressão aumentada. Quando armazenando sob uma pressão reduzida, uma vez que a composição de hidróxi aromático pode ser destilada, a razão do composto tendo os grupos ureído e a composição de hidróxi aromático na composição é controlada para estar dentro da faixa previamente descrita. Não existem limitações particulares em vasos de armazenamento, linhas e semelhantes durante armazenamento e transferência. Um vaso é selecionado de acordo com regulações de manuseio aplicáveis em consideração do manuseio de uma substância orgânica inflamável enquanto prestando atenção ao ponto de inflamação da composição sendo manuseada. Não há também limitações particulares no material, e um material conhecido pode ser usado. Exemplos de materiais podem incluir vidro, aço inoxidável, aço carbono, Hastelloy, materiais de base revestidos com vidro e materiais revestidos com Teflon (marca registrada). Equipamento conhecido pode ser incidentalmente provido como necessário como equipamento para armazenamento e transferência da composição, tal como bombas, equipamento de controle de temperatura ou instrumentação.

A composição para transferência e armazenamento do composto tendo os grupos ureído indicados acima podem ser preparadas misturando o composto tendo os grupos ureído, composição de hidróxi aromático, amônia, O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, uréia, álcool, derivado de ácido carbônico e outros componentes como previamente descrito de modo a ser preparada como previamente descrito, ou pode ser preparada adicionando e/ou removendo uma composição de hidróxi aromático, uréia, álcool, amônia ou derivado de ácido carbônico e semelhante de modo a ser formulada como previamente descrito baseada em uma composição contendo um composto tendo grupos ureído obtidos na produção do composto tendo os grupos ureído. O método para produzir o composto tendo os grupos ureído pode ser preferivelmente realizado de maneira subsequentemente descrita.

O seguinte provê uma explicação de um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído da presente forma de realização. A presente forma de realização refere-se a um método para produzir pelo menos um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído(em que um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído refere-se a um éster de ácido carbâmico N-substituído em que átomos de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) são ligados a um anel aromático) derivado de um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático a partir de um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) e uma composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2), que compreende a etapa de realizar uma reação de esterificação ou uma reação de esterificação e reação de transesterificação. (As fórmulas mencionadas acima (1) e (2) serão subsequentemente explicadas em detalhes.)

Isto é, o método de produção da presente forma de realização é um método para produzir um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado de um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático a partir do composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático (indicando um grupo de compostos hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático) (e embora subsequentemente descrito em detalhe, um método para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e subproduto amônia reagindo o composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático, bem como um método para obter O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e subproduto álcool (R^2OH) obtendo um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e subproduto amônia esterificando o composto tendo grupos ureído e um álcool (embora subsequentemente explicado, o álcool refere-se a um álcool representado por R^2OH na fórmula (4) seguinte) seguido por transesterificar o O-R^2 éster de

ácido carbâmico N-substituído e a composição de hidróxi aromático, são também formas de realizações presentes). Isto é, o método de produção da presente forma de realização é um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em uma etapa compreendendo uma reação de esterificação a partir de um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático. Mais especificamente, o método de produção da presente forma de realização é um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído na etapa compreendendo uma reação de esterificação ou uma reação de esterificação e uma reação de transesterificação. Uma reação de esterificação refere-se a uma reação em que grupos ureído ($-NHCONH_2$) em um composto tendo grupos ureído são convertidos em grupos de ácido carbâmico e amônia é formada como um subproduto deste. Mais especificamente, esta reação de esterificação contém uma reação em que os grupos ureído ($-NHCONH_2$) são convertidos em grupos O-aril éster de ácido carbâmico (-NHCOOAr) obtidos a partir de grupos ureído em um composto tendo grupos ureído e um composto hidróxi aromático, com amônia sendo formada como um subproduto acompanhando a reação, ou uma reação em que os grupos ureído ($-NHCONH_2$) são convertidos em grupos O-R^2 éster de ácido carbâmico (-NHCOOR^2) obtidos a partir de grupos ureído em um composto tendo grupos ureído e um álcool (R^2OH), com amônia sendo formada como um subproduto acompanhando a reação. O Ar indicado para os grupos mencionados acima de O-aril éster de ácido carbâmico refere-se a um resíduo em que um átomo de hidrogênio simples de um grupo hidroxila diretamente ligado a um anel de hidrocarboneto aromático foi removido a partir de um composto hidróxi aromático. Provendo uma explicação mais detalhada da reação de esterificação, a reação de esterificação refere-se a uma reação em que um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado por fórmula (43) é obtido a partir de um composto tendo grupos ureído representado por

fórmula (1) a ser subsequentemente indicado e um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2), com amônia sendo formada como um subproduto acompanhando a reação, e uma reação em que um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representado por fórmula (49) é obtido a partir de um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) e um álcool representado por fórmula (4), com amônia sendo formada como um subproduto acompanhando a reação. Além disso, a reação de transesterificação mencionada acima especificamente refere-se a uma reação em que um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representado por fórmula (49) e um composto hidróxi aromático são reagidas para converter os grupos O-éster de ácido carbâmico (-NHCOOR^2) no O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído para grupos de O-aril éster de ácido carbâmico (-NHCOOAr), com álcool (R^2OH) sendo formada como um subproduto da reação. Ar é o mesmo como previamente definido. (Estes também serão subsequentemente descritos em detalhes.)

Isto é, a presente forma de realização inclui o caso de obter um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído realizando diretamente uma reação de esterificação em um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático), e o caso de obter um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído realizando uma reação de esterificação em um composto tendo grupos ureído e um álcool, e então realizando uma reação de transesterificação em uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático).

Além disso, embora o método para produzir o composto tendo grupos ureído possa ser um método conhecido, e ser obtido por, por exemplo, reagindo uma amina primária orgânica, uréia e/ou derivado de ácido carbônico (para ser subsequentemente descrito em detalhe) e/ou ácido isociânico e/ou ácido carbâmico não N-substituído, pelo menos um tipo de composto tendo

grupos ureído derivados de uma amina primária orgânica e uréia é preferivelmente obtido por um método de produção que reage a amina primária orgânica e uréia em uma reação de ureidação.

Em seguida, uma explicação é dada de compostos usados no método de produção da presente forma de realização, e compostos que compõe a composição para transferência e armazenamento de compostos tendo grupos ureído.

<Amina primária orgânica>

Uma amina primária orgânica usada na presente forma de realização(em que uma amina primária orgânica refere-se a uma "amina primária" (mono aminas primárias e poli aminas primárias) como definido em regra C-8 da nomenclatura (Nomenclatura de Química Orgânica de IUPAC) estipulada pela International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) é uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (3). Esta regra é baseada em Recommendations on Organic & Biochemical Nomenclature. Aqui a seguir, no caso de referir-se a regras de IUPAC no presente relatório bem como regras de nomenclatura subsequentemente indicadas definidas por IUPAC (com a exceção de casos especialmente citando recomendações IUPAC de outros anos), estas referências citam "Yukikagaku · Seikagaku Meimeihou" (Organic Chemistry and Biochemistry Nomenclature) (2ª revisão publicada em Japão em 1992 por Nankodo Co., Ltd.), que é baseada em uma edição contendo todas regras de química orgânica e bioquímica, junto com regras de transliteração para Japonês, publicado como um suplemento para "Chemical Fields" em 1980 com base nas Recommendations 1979, bem como todas as subsequentes revisões e recomendações. O termo "orgânico" refere-se genericamente a um grupo de compostos considerados para serem submetidos à nomenclatura descrita nas publicações acima. Os assuntos podem ser assuntos descritos em recomendações publicadas em 1993. Os assuntos podem ser

descritos em recomendações publicadas em 1993 (no caso de ser difícil adquirir as publicações mencionadas acima publicadas no Japão, recomendações de 1979 e recomendações de 1993 podem ser consultadas). No entanto, compostos "orgânicos" cobertos por nomenclatura descrito acima incluem compostos organometálicos e complexos metálicos. Na presente invenção, embora o seguinte apresentar explicações de "orgânico", e/ou "grupos orgânicos", e/ou "substituintes" e semelhantes, bem como compostos usados na presente forma de realização, quando não especificamente explicados, estes são compostos de átomos que não incluem átomos de metal e/ou semimetais. Mais preferivelmente, "compostos orgânicos", "grupos orgânicos" e "substituintes" compostos de átomos selecionado dentre H (átomos de hidrogênio), C (átomos de carbono), N (átomos de nitrogênio), O (átomos de oxigênio), S (átomos de enxofre), Cl (átomos de cloro), Br (átomos de bromo) e I (átomos de iodo) são usados na presente forma de realização.

Além disso, para limitação "alifático" e "aromático" são frequentemente usados nas seguintes explicações. De acordo com as regras de IUPAC mencionadas acima, compostos orgânicos são descritos como sendo classificados em alifático e aromático. Compostos alifáticos referem-se à definições de grupos de acordo com compostos alifáticos com base nas recomendações de IUPAC de 1995. Compostos alifáticos são definidos nestas recomendações como "compostos de carbono saturados ou insaturados acíclicos ou cíclicos, excluindo compostos aromáticos". Grupos alifáticos, que são frequentemente usados no presente relatório, referem-se a grupos compostos dos compostos alifáticos. Estes grupos são tais que uma porção R, em que um átomo de hidrogênio foi removido a partir de um composto alifático na forma de RH, por exemplo, é definido como um grupo alifático monovalente. Além disso, grupos alifáticos e alifáticos usados na explicação da presente invenção incluem compostos alifáticos saturados e insaturados bem

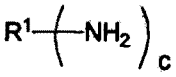
como lineares e cíclicos, e referem-se a "compostos orgânicos", "grupos orgânicos" e "substituintes" compostos de átomos selecionados a partir dos H (átomos de hidrogênio); C (átomos de carbono); N (átomos de nitrogênio); O (átomos de oxigênio); S (átomos de enxofre); Si (átomos de silício); e átomos de halogênio mencionados acima selecionados dentre Cl (átomos de cloro), Br (átomos de bromo) e I (átomos de iodo). Além disso, no caso de um grupo aromático tais como um grupo aralquila ser ligado a um grupo alifático, tais grupos são frequentemente denotados na maneira de "grupo alifático substituído com um grupo aromático" ou "grupo composto de um grupo alifático ligado a um grupo aromático". Isso é com base na reatividade na presente forma de realização, e porque propriedades relacionando-se a reações de grupos da maneira de grupos aralquila proximamente assemelham-se à reatividade de grupos alifáticos e grupos não aromáticos. Além disso, grupos reativos não aromáticos incluindo grupos tais como grupos aralquila e grupos alquila são frequentemente denotados como "grupos alifáticos opcionalmente substituídos com um grupo aromático", "grupo alifático substituído com um grupo aromático" ou "grupo alifático ligado a um grupo aromático" e semelhantes. Além disso, embora definições de acordo com regras de nomenclatura definidas por IUPAC como descrito acima são usadas quando explicando fórmulas gerais de compostos usados no presente relatório, termos tais como "amina primária orgânica" ou "O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído" são também usados, nomes comuns são frequentemente usados para os nomes de grupos específicos e nomes de compostos exemplares.

Além disso, embora números de moléculas, números de substituintes e números individuais serem frequentemente descritos no presente relatório, estes todos representam zero ou um inteiro positivo (e também frequentemente casos em que zero é tratado como um inteiro positivo).

Uma amina primária refere-se a um composto tendo um grupo

amino (-NH_2) em que um composto alifático e/ou composto aromático e/ou grupo alifático e grupo aromático são ligados. Isto é, uma amina primária orgânica como referido na presente aplicação indica uma "amina primária" que é classificada como sendo "orgânica" como previamente descrita.

Uma amina primária orgânica preferivelmente usada na presente forma de realização é uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (3):



(3)

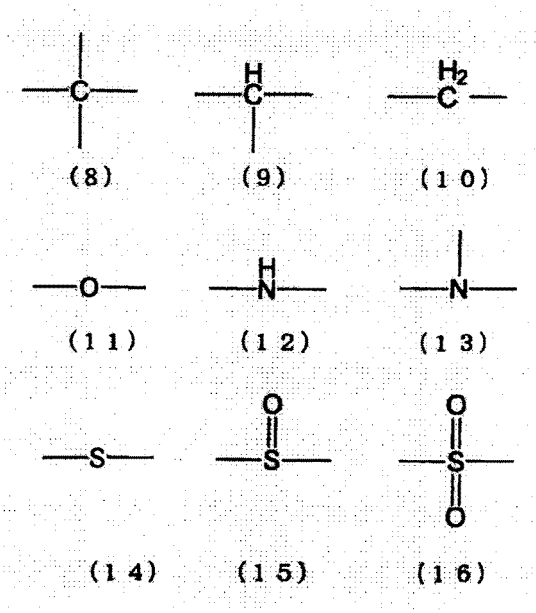
(em que

R^1 representa um grupo orgânico que contém átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, e que é substituído por número c de grupos NH_2, e c representa um inteiro de 1 a 10).

Em fórmula (3) acima, R^1 é um grupo orgânico classificado como "orgânico" como previamente descrito, e uma amina primária orgânica na presente forma de realização refere-se a uma amina primária orgânica em que número c de grupos NH_2 é ligado a um grupo orgânico contendo átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85.

R^1 representa um grupo alifático, grupo aromático ou grupo ligado a um grupo alifático e um grupo aromático, e representa um grupo composto de um grupo hidrocarboneto acíclico ou grupo hidrocarboneto cíclico (tal como um grupo hidrocarboneto monocíclico, grupo hidrocarboneto policíclico condensado, grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, grupo espiro-hidrocarboneto, grupo hidrocarboneto de montagem de anel, grupo hidrocarboneto cíclico tendo um cadeia lateral, grupo heterocíclico, grupo espiro heterocíclico, grupo de anel hetero-reticulado ou grupo de anel composto), um grupo ligado a partir de um ou mais tipos de grupos selecionados a partir dos grupos hidrocarboneto acíclico e grupos

hidrocarboneto cíclico mencionados acima, e grupos em que os grupos mencionados acima são ligados através de uma ligação covalente com um átomo de não metal específico (carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício). Além disso, a ligação covalente com um átomo de não metal específico (carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício) como descrito acima é em um estado em que os grupos mencionados acima são ligados por uma ligação covalente com, por exemplo, grupos representados pelas seguintes fórmulas (8) a (16).



Dentre estes grupos R^1, grupos R^1 que podem ser preferivelmente usados na presente forma de realização em consideração de menor suscetibilidade para a ocorrência de reações laterais contém grupos selecionados dentre o grupo consistindo de grupo hidrocarboneto acíclico e grupos hidrocarboneto cíclico selecionados dentre grupos alifáticos, grupos aromáticos e grupos ligados a grupos alifáticos e grupos aromáticos (tal como um grupo hidrocarboneto monocíclico, grupo hidrocarboneto policíclico condensado, grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, grupo espiro-hidrocarboneto, grupo hidrocarboneto de montagem de anel ou grupo hidrocarboneto cíclico tendo uma cadeia lateral), e grupos ligado a pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir deste grupo (grupos mutuamente

substituídos), tendo átomos de carbono dentro da faixa de 1 a 85 . Em consideração de fluidez e semelhantes, o número de átomos de carbono dos grupos está preferivelmente dentro de uma faixa de 1 a 70 e mais preferivelmente dentro de uma faixa de 1 a 13.

Exemplos preferíveis de aminas orgânicas compostas pelo grupo R^1 podem incluir:

1) mono aminas primárias orgânicas aromáticas opcionalmente alifáticas e/ou substituídas aromáticas em que o grupo R^1 tem 6 a 85 átomos de carbono e contém um ou mais tipos de um anel aromático opcionalmente substituídos com um grupo alifático e/ou grupo aromático, um grupo aromático no grupo R^1 é substituído com um grupo NH_2, e c é 1,

2) poli aminas primárias orgânicas aromáticas em que o grupo R^1 tem 6 a 85 átomos de carbono e contém um ou mais tipos de um anel aromático opcionalmente substituídos com um grupo alifático e/ou grupo aromático, um grupo aromático no grupo R^1 é substituído com um grupo NH_2, e c é 2 ou mais, e

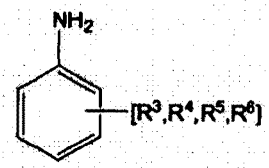
3) poli aminas primárias orgânicas alifáticas em que o grupo R^1 é um grupo alifático tendo 1 a 85 átomos de carbono opcionalmente substituídos com um grupo aromático, e c é 2 ou 3. Nas descrições acima, átomos ligados a um grupo NH_2 (e preferivelmente átomos de carbono) que estão contidos em um anel aromático são denotados como aminas orgânicas aromáticas, enquanto em casos de ligação a átomos não em um anel aromático (principalmente carbono) são denotadas como aminas orgânicas alifáticas. Grupos alifáticos mais preferíveis são grupos hidrocarboneto linear, grupos hidrocarboneto cíclico e pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir dos grupos hidrocarboneto linear e grupos hidrocarboneto cíclico (referindo-se, por exemplo, a grupos hidrocarboneto cíclico substituídos com um grupo hidrocarboneto linear ou grupos hidrocarboneto linear substituídos com um

grupo hidrocarboneto cíclico) tendo 6 a 70 átomos de carbono.

O seguinte relaciona exemplos específicos de aminas primárias orgânicas preferíveis.

1) Monoaminas primárias orgânicas aromáticas

Mono aminas primárias orgânicas aromáticas opcionalmente alifáticas e/ou substituídas aromáticas em que o grupo R^1 é um grupo tendo 6 a 85 átomos de carbono e contém um ou mais tipos de um anel aromático opcionalmente substituídos com um grupo alifático e/ou grupo aromático, um grupo aromático no grupo R^1 é substituído com um grupo NH_2 e c é 1, preferivelmente monoaminas primárias orgânicas aromáticas em que o grupo R^1 é um grupo tendo 6 a 70 átomos de carbono e c é 1, e mais preferivelmente em consideração de fluidez e semelhantes, monoaminas primárias orgânicas aromáticas em que o grupo R^1 tem 6 a 13 átomos de carbono e c é 1, que são monoaminas primárias orgânicas aromáticas representadas pela seguinte fórmula (5).



(5)

(em que

pelo menos um local na posição orto e/ou posição para do grupo NH_2 de uma monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) não é substituído, grupos R^3 a R^6 respectivamente representam um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel,

grupos R^3 a R^6 podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^3 a R^6 podem juntos ligar-se para formar um anel com um anel aromático, grupos R^3 a R^6 são átomos de

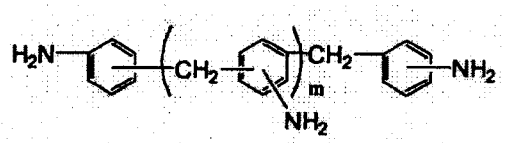
hidrogênio ou grupos compostos de grupos em que um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono de grupos R^3 a R^6 é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e o número total de átomos de carbono que compõe a monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) é um inteiro de 6 a 13).

Exemplos preferíveis de monoaminas primárias orgânicas aromáticas representadas por fórmula (5) podem incluir as em que os grupos R^3 a R^6 são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre grupos alquila tais como um grupo metila ou um grupo etila, e exemplos de tais monoaminas primárias orgânicas aromáticas podem incluir anilina, aminotolueno (incluindo isômeros), dimetilanilina (incluindo isômeros), dietilanilina (incluindo isômeros), dipropilanilina (incluindo isômeros), aminonaftaleno (incluindo isômeros), aminometilnaftaleno (incluindo isômeros), dimetilnaftilamina (incluindo isômeros) e trimetilnaftilamina (incluindo isômeros), com anilina sendo usada mais preferivelmente.

2) Poli aminas primárias orgânicas aromáticas

Poli aminas primárias orgânicas aromáticas em que o grupo R^1 é um grupo tendo 6 a 85 átomos de carbono e contendo um ou mais anéis aromáticos opcionalmente substituídos com um grupo alifático e/ou grupo aromático, um grupo aromático no grupo R^1 é substituído com um grupo NH_2 e c é 2 ou mais, preferivelmente poli aminas primárias orgânicas aromáticas em que o grupo R^1 é um grupo tendo 6 a 70 átomos de carbono e c é 2 ou mais, e mais preferivelmente em consideração de fluidez e semelhantes, poli aminas primárias orgânicas aromáticas em que o grupo R^1 contém um ou mais anéis aromáticos, o anel aromático são grupos de 6 a 13 átomos de carbono que podem ser ainda substituídos com um grupo alquila, um grupo arila ou um

grupo aralquila, um grupo NH_2 é ligado ao grupo aromático contido no grupo R^1, e c é 2 ou mais. Exemplos de tais poli aminas orgânicas aromáticas podem incluir diaminobenzeno (incluindo isômeros), diaminotolueno (incluindo isômeros), metilenodianilina (incluindo isômeros), diaminomesitileno (incluindo isômeros), diaminobifenila (incluindo isômeros), diaminodibenzila (incluindo isômeros), bis (aminofenil)metano (incluindo isômeros), bis (aminofenil)propano (incluindo isômeros), bis(aminofenil) éter (incluindo isômeros), bis(aminofenoxietano) (incluindo isômeros), α- α'-diaminoxileno (incluindo isômeros), diaminoanisol (incluindo isômeros), diaminofenetol (incluindo isômeros), diaminonaftaleno (incluindo isômeros), diamino-metilbenzeno (incluindo isômeros), diamino-metilpiridina (incluindo isômeros), diamino-metilnaftaleno (incluindo isômeros) e polifenil poli aminas de polimetileno representadas pela seguinte fórmula (17).



(17)

(em que,

m é um inteiro de 0 a 6).

3) Poli aminas primárias orgânicas alifáticas

Poli aminas primárias orgânicas alifáticas em que o grupo R^1 de uma amina orgânica representada por fórmula (3) é um grupo alifático em que o número de átomos de carbono é um inteiro dentro de uma faixa de 1 a 85 e que pode ser substituído com um grupo aromático, e c é 2 ou 3.

Aminas orgânicas mais preferíveis são aminas orgânicas primárias alifáticas em que o grupo alifático é um grupo hidrocarboneto linear, grupo hidrocarboneto cíclico ou grupo ao qual é ligado pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir dos grupos hidrocarboneto linear e os grupos

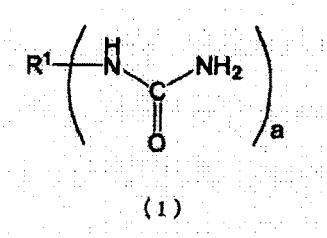
hidrocarboneto cíclico (tais como grupo hidrocarboneto cíclico substituído com um grupo hidrocarboneto linear ou grupo hidrocarboneto linear substituído com um grupo hidrocarboneto cíclico). Mais preferivelmente, a amina orgânica é uma poliamina primária orgânica alifática em que o grupo R^1 é um grupo alifático que é um grupo hidrocarboneto acíclico, um grupo hidrocarboneto cíclico ou um grupo ao qual é ligado pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir dos grupos hidrocarboneto acíclico e os grupos hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto cíclico substituído com um grupo hidrocarboneto acíclico ou grupo hidrocarboneto acíclico substituído com um grupo hidrocarboneto cíclico) tendo 1 a 70 átomos de carbono, e c é 2 ou 3. Em consideração de fluidez e semelhantes durante produção industrial de grande volume, a amina orgânica é mais preferivelmente uma poli amina primária orgânica alifática em que o grupo R^1 é um grupo hidrocarboneto acíclico, um grupo hidrocarboneto cíclico ou um grupo ao qual é ligado pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir dos grupos hidrocarboneto acíclico e os grupos hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto cíclico substituído com um grupo hidrocarboneto acíclico ou um grupo hidrocarboneto acíclico substituído com um grupo hidrocarboneto cíclico) tendo 6 a 13 átomos de carbono e composto de átomos de carbono e átomos de hidrogênio. Isto é, isso se refere ao caso em que o grupo R^1 é um grupo alquila linear e/ou ramificado, um grupo cicloalquila ou um grupo composto dos grupos alquila e grupos cicloalquila. Exemplos destas aminas orgânicas podem incluir di-aminas primárias alifáticas tais como etilenodiamina, diaminopropano (incluindo isômeros), diaminobutano (incluindo isômeros), diaminopentano (incluindo isômeros), diaminohexano (incluindo isômeros) ou diaminodecano (incluindo isômeros); triaminas alifáticas tais como triaminohexano (incluindo isômeros), triaminononano (incluindo isômeros) ou triaminodecano (incluindo isômeros); e, poliaminas alifáticas cíclicas substituídas tais como diaminociclobutano

(incluindo isômeros), diaminociclo-hexano (incluindo isômeros), 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclo-hexilamina (formas cis e/ou trans) ou metilenobis(ciclo-hexilamina) (incluindo isômeros). Exemplos destas podem incluir alquil di-aminas primárias tais como etilenodiamina, diaminopropano (incluindo isômeros), diaminobutano (incluindo isômeros), diaminopentano (incluindo isômeros), diaminohexano (incluindo isômeros), diaminoheptano (incluindo isômeros), diaminooctano (incluindo isômeros), diaminononano (incluindo isômeros) ou diaminodecano (incluindo isômeros); tri-aminas primárias de alquila tais como triaminohexano (incluindo isômeros), triaminoheptano (incluindo isômeros), triaminooctano (incluindo isômeros), triaminononano (incluindo isômeros) ou triaminodecano (incluindo isômeros); cicloalquil aminas primárias tais como diaminociclobutano (incluindo isômeros), diaminociclopentano (incluindo isômeros) ou diaminociclo-hexano (incluindo isômeros); e, ciclo-hexil poli-aminas primárias substituídas com um grupo alquila tais como 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclo-hexilamina (formas cis e/ou trans) ou metilenobis(ciclo-hexilamina) (incluindo isômeros).

As aminas orgânicas primárias explicadas em 1), 2) e 3) acima são usadas preferivelmente, e em particular a amina primária orgânica é mais preferivelmente uma amina primária orgânica, diamina primária orgânica ou triamina primária orgânica(em que c em fórmula (3) acima é um inteiro de 1, 2 ou 3).

<Composto tendo grupos ureído>

Um composto tendo grupos ureído usados quando produzindo um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir da composição para transferência e armazenamento do composto tendo grupos ureído da presente forma de realização e/ou uma composição de hidróxi aromático é um composto representado pela seguinte fórmula (1):



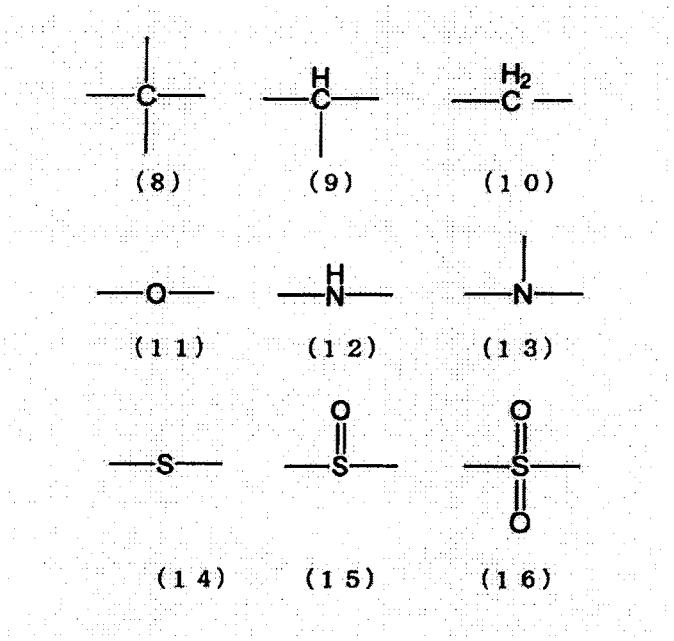
(1)

(em que

R^1 representa um grupo orgânico que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, e que é substituído por um número de grupos ureído, e a representa um inteiro de 1 a 10).

O composto tendo os grupos ureído representados por fórmula (1) acima é um composto tendo "grupos ureído" como definido em regra de nomenclatura C-971 estipulada por IUPAC. Em fórmula (1) acima, R^1 é um grupo orgânico classificado como "orgânico" como descrito acima, e o composto tendo os grupos ureído de acordo com a presente forma de realização é um composto tendo grupos ureído ligado a um número de grupos ureído (-NH-$CONH_2$) incluindo átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85. R^1 representa um grupo alifático, um grupo aromático ou um grupo ligado a um grupo alifático e um grupo aromático, e representa um grupo composto de um grupo hidrocarboneto acíclico ou um grupo hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto monocíclico, um grupo hidrocarboneto policíclico condensado, um grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, um grupo espiro-hidrocarboneto, um grupo hidrocarboneto de montagem de anel, um grupo hidrocarboneto cíclico tendo uma cadeia lateral, um grupo heterocíclico, um grupo espiro heterocíclico, um grupo de anel hetero-reticulado ou um grupo heterocíclico), um grupo ligado a partir de um ou mais tipos de grupos selecionados a partir dos grupos hidrocarboneto acíclico e grupos hidrocarboneto cíclico mencionados acima, e grupos em que os grupos mencionados acima são ligados através de uma ligação covalente com um átomo de não metal específico (carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou

silício). Além disso, uma ligação covalente com um átomo de não metal específico (carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício) como descrito acima é em um estado em que os grupos mencionados acima são ligados por uma ligação covalente com, por exemplo, grupos representados pelas seguintes fórmulas (8) a (16).



Dentre estes grupos R^1, grupos R^1 que podem ser preferivelmente usados na presente forma de realização em consideração de menor suscetibilidade para a ocorrência de reações laterais contêm grupos selecionados dentre o grupo consistindo de grupos hidrocarboneto acíclico e grupos hidrocarboneto cíclico selecionados dentre grupos alifáticos e grupos aromáticos (tais como um grupo hidrocarboneto monocíclico, um grupo hidrocarboneto policíclico condensado, um grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, um grupo espiro-hidrocarboneto, um grupo hidrocarboneto de montagem de anel ou um grupo hidrocarboneto cíclico tendo uma cadeia lateral), e grupos ligados a pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir deste grupo (grupos mutuamente substituídos), contendo 1 a 85 átomos de carbono. Em consideração de fluidez e semelhantes da composição para transferência e armazenamento, o número de átomos de carbono é

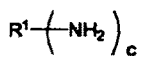
preferivelmente 1 a 70 e mais preferivelmente 1 a 13.

Exemplos preferíveis de compostos tendo um grupo ureído composto pelo grupo R^1 podem incluir: 1) monouréias orgânicas aromáticas N-substituídas em que o grupo R^1 tem 6 a 85 átomos de carbono e contém um ou mais tipos de um anel aromático opcionalmente substituídos com um grupo alifático e/ou um grupo aromático, um grupo aromático no grupo R^1 é substituído com um grupo ureído, e c é 1, 2) Poliuréias orgânicas aromáticas N-substituídas em que o grupo R^1 tem 6 a 85 átomos de carbono e contém um ou mais tipos de um anel aromático opcionalmente substituídos com um grupo alifático e/ou um grupo aromático, um grupo aromático no grupo R^1 é substituído com um grupo ureído, e c é 2 ou mais, e 3) Poliuréias orgânicas alifáticas N-substituídas em que o grupo R^1 é um grupo alifático tendo 1 a 85 átomos de carbono opcionalmente substituídos com um grupo aromático, e c é 2 ou 3. Nas descrições acima, compostos em que átomos ligados a um grupo ureído (principalmente átomos de carbono) que estão contidos em um anel aromático são denotados como uréias orgânicas aromáticas N-substituídas, enquanto casos de ligar a átomos não em um anel aromático (principalmente átomos de carbono) são denotados como uréias orgânicas alifáticas N-substituídas. Mais preferivelmente, um grupo alifático é um grupo hidrocarboneto linear, um grupo hidrocarboneto cíclico e pelo menos um tipo de grupo ligado a um grupo selecionado a partir dos grupos hidrocarboneto linear e grupos hidrocarboneto cíclico (referindo-se, por exemplo, a grupos hidrocarboneto cíclico substituídos com um grupo hidrocarboneto linear ou grupos hidrocarboneto linear substituídos com um grupo hidrocarboneto cíclico) tendo 6 a 70 átomos de carbono.

Embora o método para produzir o composto tendo os grupos ureído possa ser um método conhecido, e possa ser obtido por, por exemplo, reagindo uma amina primária orgânica, uréia e/ou derivado de ácido carbônico

(para ser subsequentemente descrito em detalhe) e/ou ácido isociânico e/ou ácido carbâmico não N-substituído, pelo menos um tipo de composto tendo os grupos ureído derivados de uma amina primária orgânica e uréia é preferivelmente obtida por um método de produção que reage a amina primária orgânica e uréia em uma reação de ureidação, e na presente forma de realização, um composto tendo grupos ureído preferivelmente usa um composto tendo grupos ureído obtidos em um processo que inclui a seguinte etapa A:

etapa (A): uma etapa de obter pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído derivados de uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (3) e uréia por ureidação da amina primária orgânica e a uréia em uma fase líquida e eliminando ou extraindo para uma fase gasosa a amônia formada como um subproduto na reação de ureidação:



(3)

(em que

R^1 representa um grupo orgânico que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, e que é substituído por número c de grupos NH_2, e c representa um inteiro de 1 a 10).

Um composto tendo grupos ureído obtidos em etapa (A) acima é um composto tendo grupos ureído que têm um grupo orgânico derivado da amina primária orgânica mencionada acima. Isto é, esta etapa contém reagir grupos amino primários orgânicos ($-NH_2$) da amina primária orgânica com uréia para formar os grupos ureído (esta reação é frequentemente referida como uma reação de ureidação na presente forma de realização). Grupos ($-CONH_2$) dentro dos grupos ureído ($-NHCONH_2$) são formados a partir da uréia reagida na reação. Além disso, a indicado em fórmula (1) é um inteiro igual a ou menor que c indicado em fórmula (3), e preferivelmente é um inteiro tal que a = c.

Embora o termo "derivado" seja frequentemente usado no presente

relatório, o termo "derivado" é usado no sentido de herdar um grupo possuído por uma matéria prima quando um grupo funcional da matéria prima composta varia em uma reação. Por exemplo, na reação descrita acima em que o composto tendo os grupos ureído é obtido a partir de uma amina primária orgânica, o composto tendo os grupos ureído tem uma estrutura que herdou os grupos amino primários orgânicos ($-NH_2$) da amina primária orgânica, enquanto os grupos ($-CONH_2$) dentro dos grupos ureído referem-se a grupos ($-CONH_2$) contidos na uréia reagida (NH_2CONH_2). Deste modo, na fórmula mencionada acima (1) e (3), a é um inteiro igual a ou menor que c, e a e c são preferivelmente os mesmos inteiros.

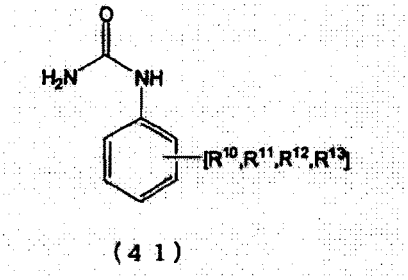
O seguinte indica exemplos específicos de compostos preferíveis tendo grupos ureído. Um grupo ureído é o mesmo de um substituinte, e no presente relatório, é descrito como o nome de um composto na forma de uma "uréia N-substituída (nome substituinte)". A fim de claramente indicar que o átomo de nitrogênio (N) da uréia é substituído (isto é, que o átomo de nitrogênio não é um grupo NH_2), "N-substituído" é claramente indicado, o substituinte é claramente indicado como sendo um grupo aromático ou grupo alifático, e o termo "orgânico" é também intencionalmente claramente indicado no sentido que o composto é um composto orgânico. Um composto é claramente indicado como sendo "monouréia" no caso de um grupo ureído simples dentro de uma molécula deste, ou é claramente indicado como sendo a "poliuréia" no caso de grupos ureído múltiplos dentro de uma molécula desta. Uma vez que o composto é uma uréia N-substituída, mesmo em casos de grupos ureído múltiplos, os grupos ureído contidos em um composto tendo grupos ureído explicados abaixo são indicados anexando o prefixo "poli", "di" ou "tri" e semelhantes imediatamente antes do termo "uréia" como indicado acima para facilitar distinção dos mesmos.

Em todo o presente relatório, as descrições de "substituído"

"mono" não são usadas, mas sim descrições de acordo com nomenclatura IUPAC ou nomes comuns são descritos quando indicando exemplos de compostos específicos.

1) Monouréia orgânica aromática N-substituída

Monouréia orgânica aromática N-substituída refere-se àquela em que o grupo R^1 tem 6 a 85 átomos de carbono e contém um ou mais tipos de um anel aromático opcionalmente substituídos com um grupo alifático e/ou grupo aromático, um grupo aromático no grupo R^1 é substituído com um grupo ureído, e c é 1, preferivelmente refere-se a uma monouréia orgânica aromática em que o grupo R^1 é um grupo tendo 6 a 70 átomos de carbono e c é 1, e em consideração de fluidez e semelhantes, mais preferivelmente refere-se a uma monouréia orgânica aromática N-substituída em que o grupo R^1 é um grupo tendo 6 a 13 átomos de carbono e c é 1, e é uma monouréia orgânica aromática N-substituída representada pela seguinte fórmula (41):



(41)

(em que

pelo menos um local na posição orto e/ou para posição de um grupo ureído da monouréia orgânica aromática N-substituída representado por fórmula (41) não é substituída, grupos R^{10} a R^{13} respectivamente representam um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel, grupos R^{10} a R^{13} podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^{10} a R^{13} podem juntos ligar-se para formar um anel com um anel aromático, grupos R^{10} a R^{13} são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre grupos compostos de grupos em que um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo

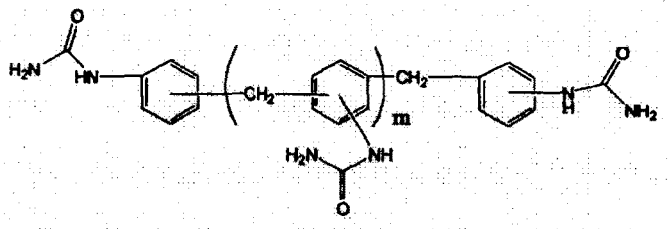
alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e o número total de átomos de carbono que compõe a monouréia orgânica aromática N-substituída representada por fórmula (41), excluindo grupos ureído (-NH-CO-NH_2), é um inteiro de 6 a 13).

Exemplos preferíveis de tais monouréias orgânicas aromáticas N-substituídas representadas por fórmula (41) podem incluir aquelas em que grupos R^{10} a R^{13} são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre grupos alquila tais como um grupo metila ou um grupo etila, e exemplos de tais monouréias orgânicas aromáticas N-substituídas podem incluir N-feniluréia, N-toliluréia (incluindo isômeros), N-dimetilfeniluréia (incluindo isômeros), N-dietilfeniluréia (incluindo isômeros), N-dipropilfeniluréia (incluindo isômeros), N-naftalen-iluréia (incluindo isômeros), N-metilnaftalen-iluréia (incluindo isômeros), N-dimetilnaftalen-iluréia (incluindo isômeros) e N-trimetilnaftalen-iluréia (incluindo isômeros). Em particular, N-feniluréia é usada mais preferivelmente.

2) Poliuréia orgânica aromática N-substituída

Poliuréia orgânica aromática N-substituída refere-se àquela em que o grupo R^1 é um grupo tendo 6 a 85 átomos de carbono que contém um ou mais anéis aromáticos opcionalmente substituídos com um grupo alifático e/ou um grupo aromático, um grupo aromático no grupo R^1 é substituído com um grupo ureído e c é 2 ou mais, preferivelmente uma poliuréia orgânica aromática N-substituída em que o grupo R^1 é um grupo tendo 6 a 70 átomos de carbono e c é 2 ou mais, e mais preferivelmente em consideração de fluidez e semelhantes, uma poliuréia orgânica aromática N-substituída em que o grupo R^1 contém um ou mais tipos de anel aromáticos, o anel aromático tem 6 a 13 átomos de carbono e pode ser ainda substituído com um grupo alquila, um grupo arila ou

um grupo aralquila, um grupo ureído é ligado ao grupo aromático contido no grupo R1, e c é 2 ou mais. Exemplos de tais poliuréias orgânicas aromáticas N-substituídas podem incluir N,N'-fenileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-metilfenileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-mesitileno difenileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-mesitileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-bifenileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-dibenzildiuréia (incluindo isômeros), N,N'-propan-diilfenileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-oxidifenileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-difenil-diil-dipropan-diildiuréia (incluindo isômeros), N,N'-fenileno dimetileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-metoxifenileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-etoxifenileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-naftalen-diiluréia (incluindo isômeros), N,N'-piridina-diildi metileno diuréia (incluindo isômeros), N,N'-naftalen-diildimetileno diuréia (incluindo isômeros), e poliaminas de polifenileno de polimetileno representado pela seguinte fórmula (42).



(42)

(em que

m é um inteiro de 0 a 6).

3) Poliuréia orgânica alifática N-substituída

Poliuréia orgânica alifática N-substituída é aquela em que o grupo R^1 é um grupo alifático tendo 1 a 85 átomos de carbono que é opcionalmente substituído com um grupo aromático, e c é 2 ou 3. Poliuréias orgânicas alifáticas N-substituídas preferíveis são poliuréias orgânicas alifáticas N-substituídas em que o grupo alifático é um grupo hidrocarboneto linear, um grupo hidrocarboneto cíclico (incluindo grupos aromáticos) ou um grupo ao

qual é ligado pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir dos grupos hidrocarboneto linear e os grupos hidrocarboneto cíclico (tais como grupo hidrocarboneto cíclico substituído com um grupo hidrocarboneto linear ou grupo hidrocarboneto linear substituído com um grupo hidrocarboneto cíclico). Mais preferivelmente, a poliuréia orgânica alifática N-substituída é uma poliuréia orgânica alifática N-substituída em que o grupo R^1 é um grupo alifático que é um grupo hidrocarboneto acíclico, um grupo hidrocarboneto cíclico ou um grupo ao qual é ligado pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir dos grupos hidrocarboneto acíclico e os grupos hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto cíclico substituído com um grupo hidrocarboneto acíclico ou grupo hidrocarboneto acíclico substituído com um grupo hidrocarboneto cíclico) tendo 1 a 70 átomos de carbono, e c é 2 ou 3. Em consideração de fluidez e semelhantes durante produção industrial de grande volume, a poliuréia orgânica alifática N-substituída é mais preferivelmente uma poliuréia orgânica alifática N-substituída em que o grupo R^1 é um grupo hidrocarboneto acíclico, um grupo hidrocarboneto cíclico ou um grupo ao qual é ligado pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir dos grupos hidrocarboneto acíclico e os grupos hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto cíclico substituído com um grupo hidrocarboneto acíclico ou um grupo hidrocarboneto acíclico substituído com um grupo hidrocarboneto cíclico) tendo 6 a 13 átomos de carbono que é composto de átomos de carbono e átomos de hidrogênio. Isto é, isso se refere ao caso em que o grupo R^1 é um grupo alquila linear ou ramificado, um grupo cicloalquila ou um grupo composto dos grupos alquila e grupo cicloalquila. Exemplos destes podem incluir poliuréias orgânicas alifáticas N-substituídas tais como metilenodiuréia, 1,2-dimetilenodiuréia, 1,3-trimetilenodiuréia, 1,4-tetrametilenodiuréia, 1,5-pentametilenodiuréia, 1,6-hexametilenodiuréia, 1,8-octametilenodiuréia, ciclopentano-diuréia (incluindo isômeros), ciclo-hexano-diuréia (incluindo

isômeros), ciclo-heptano-diuréia (incluindo isômeros), ciclooctano-diuréia (incluindo isômeros), metilciclopentano-diuréia (incluindo isômeros), etilciclopentano-diuréia (incluindo isômeros), metilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros), etilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros), propilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros), butilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros), pentilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros), hexilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros), dimetilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros), dietilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros), dibutilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros), 1,5,5-trimetilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros), 1,5,5-trietilciclo-hexano diuréia (incluindo isômeros), 1,5,5-tributilciclo-hexano-diuréia (incluindo isômeros) ou 3-ureidometil-3,5,5-trimetilciclo-hexiluréia.

O seguinte provê uma explicação sobre o álcool usado na presente forma de realização.

<Álcool>

Apesar dos detalhes de etapa (A) serem descritos mais tarde, etapa (A) pode ser realizada na presença de água e/ou álcool e/ou uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático) em adição à amina primária orgânica e uréia.

No caso de realizar etapa (A) na presença de uma composição de hidróxi aromático, uma etapa (A) é preferivelmente realizada na presença da composição de hidróxi aromático mencionada acima (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2)).

Além disso, um aspecto da presente forma de realização é um processo para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído que compreende a etapa (A), uma seguinte etapa (R) e uma etapa (P) seguinte

realizando a etapa (R) (etapa de reação de esterificação) para obter O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído (os detalhes dos quais serão subsequentemente descritos) e então efetuar a etapa (P) (etapa de reação de transesterificação) para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído após ter realizado a etapa (A). Um álcool representado pela seguinte fórmula (4) é também usado para o álcool usado desta vez. A composição de hidróxi aromático usada na seguinte etapa (P) (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)) será subsequentemente descrita em detalhe:

etapa (R): uma etapa de obter O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo o pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído e um álcool representado pela seguinte fórmula (4) em uma fase líquida e extraindo amônia formada como um subproduto para uma fase gasosa(em que o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representa um éster de ácido carbâmico N-substituído em que átomos de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) são ligados a um grupo R^2 derivado de um álcool), e

etapa (P): uma etapa de obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e a composição de hidróxi aromático (contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2)) em uma fase líquida e extraindo álcool formado como um subproduto para uma fase gasosa:

Um álcool representado pela seguinte fórmula (4) é preferivelmente usado para o álcool usado na presente forma de realização.

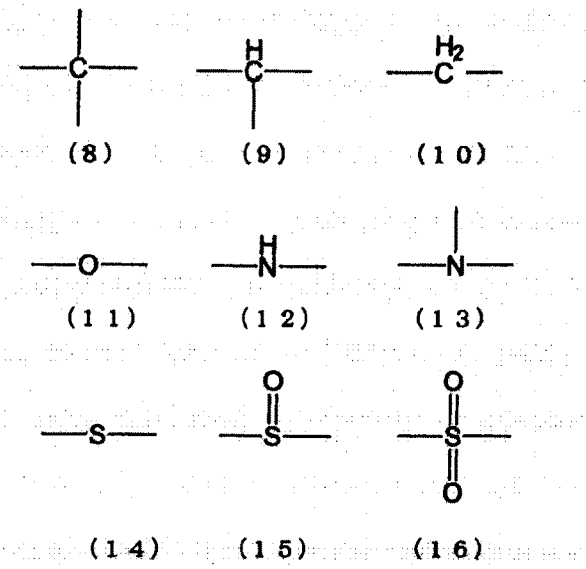
$$R^2OH \quad (4)$$

(em que

R^2 representa um grupo composto de um grupo alifático ou um grupo alifático em que um grupo aromático é ligado, que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 14, e o grupo OH do

álcool representado por fórmula (4) é um grupo OH que não é ligado a um anel aromático).

Um álcool preferível representado por fórmula (4) é um álcool em que o grupo R^2 é um grupo composto de um grupo alifático ou um grupo alifático em que um grupo aromático é ligado, e em que o grupo OH de um álcool representado por fórmula (4) é um grupo OH que não é ligado a um grupo aromático. O grupo R^2 representa um grupo composto de um grupo hidrocarboneto acíclico ou um grupo hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto monocíclico, um grupo hidrocarboneto policíclico condensado, um grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, um grupo espiro-hidrocarboneto, um grupo hidrocarboneto de montagem de anel, um grupo hidrocarboneto cíclico tendo uma cadeia lateral, um grupo heterocíclico, grupo espiro heterocíclico, um grupo anel hetero-reticulado ou um grupo heterocíclico), um grupo ligado a partir de um ou mais tipos de grupos selecionados a partir dos grupos hidrocarboneto acíclico e grupos hidrocarboneto cíclico mencionados acima, e um grupo em que os grupos mencionados acima são ligados através de uma ligação covalente com um átomo de não metal específico (carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício). Além disso, uma ligação covalente com um átomo de não metal específico (carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício) como descrito acima é em um estado em que os grupos mencionados acima são ligados por uma ligação covalente com, por exemplo, grupos representados pelas seguintes fórmulas (8) a (16).



Dentre estes grupos R^2, grupos R^2 que podem ser preferivelmente usados na presente forma de realização em consideração de menos suscetibilidade para a ocorrência de reações laterais contêm grupos selecionados dentre o grupo consistindo de grupo hidrocarboneto acíclico e grupos hidrocarboneto cíclico selecionados dentre grupos alifáticos e/ou grupos alifáticos em que grupos aromáticos são ligados (tais como um grupo hidrocarboneto monocíclico, um grupo hidrocarboneto policíclico condensado, um grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, um grupo espiro-hidrocarboneto, um grupo hidrocarboneto de montagem de anel ou um grupo hidrocarboneto cíclico tendo uma cadeia lateral), grupos ligado a pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir deste grupo (grupos mutuamente substituídos), e grupos em que os grupos mencionados acima são substituídos com um grupo aromático, e que contém um número de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 14. Na etapa (P) da presente forma de realização, um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é preferivelmente transesterificado com uma composição de hidróxi aromático e o subproduto álcool é removido para fora do sistema. Deste modo, o álcool usado na etapa (A) e/ou a etapa (R) preferivelmente tem um ponto de ebulição que é menor que o composto hidróxi aromático contido na composição de hidróxi aromático, e mais preferivelmente

o grupo R^2 é um grupo contendo um número de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 10. O grupo R^2 mais preferivelmente contém um número de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 8. Ainda mais preferivelmente, R^2 é um grupo alquila, grupo em que um grupo cicloalquila e um grupo alquila são ligados, ou um grupo aralquila. Exemplos preferíveis de tais álcoois podem incluir metanol, etanol, propanol (incluindo isômeros), butanol (incluindo isômeros), pentanol (incluindo isômeros), hexanol (incluindo isômeros), heptanol (incluindo isômeros), octanol (incluindo isômeros), álcool benzílico, tolil metanol (incluindo isômeros), xilil metanol (incluindo isômeros) e álcool de feniletila (incluindo isômeros). Exemplos ainda mais preferíveis de alcóois podem incluir os alcóois listados acima em que R^2 é um grupo alquila, e dentre os átomos de carbono que compõe o grupo alquila, o átomo de carbono na posição α do grupo hidróxi (átomo de carbono que compõe o grupo alquila ao qual um grupo OH é ligado) é um átomo de carbono secundário ($-CH_2-$).

Em seguida, uma explicação é dada da composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)) usada na presente forma de realização.

<Composição de hidróxi aromático>

Existem vários métodos e etapas que usam uma composição de hidróxi aromático na presente forma de realização. Uma composição de hidróxi aromático é usada como um composto que compõe a composição para transferência e armazenamento do composto tendo os grupos ureído como previamente descrito. Além disso, uma etapa (A) é preferivelmente realizada na presença de uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)). Além disso, uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)) é usada também na etapa (P) descrita na explicação acima do álcool. Além disso,

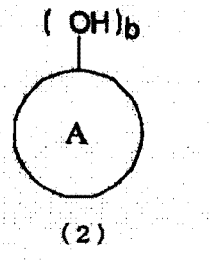
um exemplo de outro aspecto da presente forma de realização é um método para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por um processo que inclui a etapa (A) (etapa de reação de ureidação) e uma seguinte etapa (B) (etapa de reação de esterificação), e uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)) é também usada na etapa (B):

etapa (B): uma etapa de obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo o pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído com uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)) em uma fase líquida e extraindo a amônia formada como um subproduto para uma fase gasosa.

Embora existam casos que uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)) seja usada em adição às etapas listadas acima, a composição de hidróxi aromático usada na presente forma de realização é uma composição de hidróxi aromático que contém pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) como previamente descrito.

Uma composição de hidróxi aromático na presente forma de realização refere-se a uma composição que contém um tipo de composto hidróxi aromático ou uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi aromático. O seguinte provê uma explicação de compostos hidróxi aromático preferivelmente usados como compostos hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático.

Compostos hidróxi aromático que compõem (ou estão contidos na) a composição de hidróxi aromático são pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2):



(2)

(em que

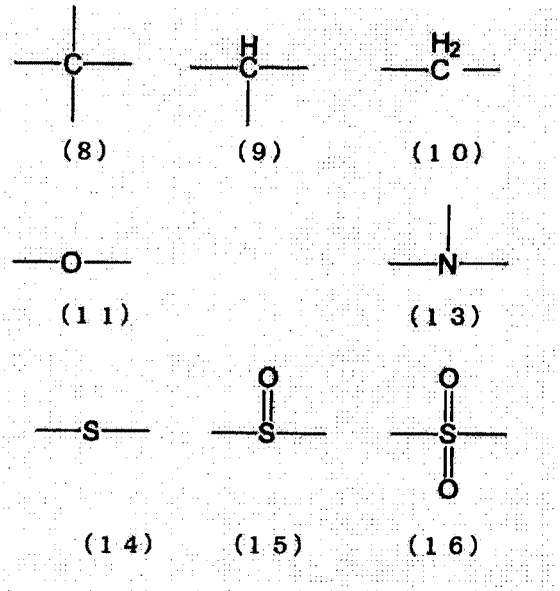
anel A representa um grupo orgânico que contém 6 a 50 átomos de carbono e que contém um grupo aromático substituído com número b de grupos hidróxi em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas, pode ser um anel simples ou anéis múltiplos, pode ser um anel heterocíclico ou pode ser substituído por outros substituintes, e b é um inteiro de 1 a 6).

Exemplos de substituintes que substituem um grupo aromático de um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) acima podem incluir grupos selecionados dentre um átomo de hidrogênio, um átomo de halogênio, grupos alifáticos e grupos aromáticos e grupos em que os grupos mencionados acima são ligados que são compostos de grupo hidrocarboneto acíclico ou grupos hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto monocíclico, um grupo hidrocarboneto policíclico condensado, um grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, um grupo espiro-hidrocarboneto, um grupo hidrocarboneto de montagem de anel, um grupo hidrocarboneto cíclico tendo uma cadeia lateral, um grupo heterocíclico, um grupo espiro heterocíclico, um grupo anel hetero-reticulado ou um grupo heterocíclico), grupos ligados a um ou mais tipos de grupos selecionados a partir dos grupos hidrocarboneto acíclico e os grupos hidrocarboneto cíclico, e grupos em que os grupos mencionados acima são ligados através de uma ligação covalente com um átomo de não metal específico (átomo de carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício). Além disso, ligação covalente com um átomo de não metal específico como descrito acima (átomo de carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício) refere-se a um estado em que, por exemplo, um grupo

representado pelas seguintes fórmulas (8) a (11) e fórmulas (13) a (16) e os grupos mencionados acima são ligados com uma ligação covalente.

Anel A tem uma estrutura que contém pelo menos uma estrutura selecionada dentre o grupo consistindo de um anel benzeno, um anel naftaleno e um anel antraceno, anel A preferivelmente tem uma estrutura que contém pelo menos uma estrutura selecionada dentre o grupo consistindo de um anel benzeno, um anel naftaleno e um anel antraceno, e mais preferivelmente anel A tem uma estrutura que contém um anel simples benzeno.

Os grupos hidróxi ligados ao grupo aromático de anel A são grupos hidróxi que são ligados a um átomo de carbono do grupo aromático de anel A, e o número dos grupos hidróxi é preferivelmente um inteiro de 1 a 6, mais preferivelmente um inteiro de 1 a 3, ainda mais preferivelmente um inteiro de 1 a 2, e ainda mais preferivelmente 1 (isto é, b=1).



Dentre tais substituintes, substituintes que podem ser preferivelmente usados na presente forma de realização em consideração de menor suscetibilidade para a ocorrência de reações laterais contêm grupos selecionados dentre o grupo consistindo de grupo hidrocarboneto acíclico e grupos hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto monocíclico, um grupo hidrocarboneto policíclico condensado, um grupo

hidrocarboneto cíclico reticulado, um grupo espiro-hidrocarboneto, um grupo hidrocarboneto de montagem de anel ou um grupo hidrocarboneto cíclico tendo uma cadeia lateral), e grupos ligados a pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir deste grupo (grupos mutuamente substituídos).

Além disso, no caso de transferir uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído em uma temperatura elevada ou no caso de reagir um composto tendo grupos ureído e/ou um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático para obter um O-aril éster ~~de ácido c~~arbâmico N-substituído em uma temperatura elevada, anel A do composto hidróxi aromático é preferivelmente um composto hidróxi aromático composto de um grupo tendo pelo menos um substituinte inativo (incluindo átomos de hidrogênio) em adição ao grupo aromático e grupos hidróxi ligado ao grupo aromático (aqui, um substituinte inativo refere-se a, por exemplo, um substituinte que não tem um hidrogênio ativo em que o pKa de um composto em que o substituinte inativo é ligado a um grupo fenila é 30 ou menor, embora possa ter um grupo hidroxila aromática).

Provendo uma explicação mais detalhada do substituinte, o composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) é um composto hidróxi aromático tendo pelo menos um substituinte selecionado a partir dos grupos de substituintes indicados abaixo em adição ao grupo aromático e grupo hidróxi ligado ao grupo aromático:

(i) um átomo de hidrogênio,

(ii) um grupo composto de átomos de carbono e átomos de hidrogênio (que pode também formar uma estrutura de anel por ligação com anel A),

(iii) um grupo composto de átomos de carbono, átomos de hidrogênio e átomos de oxigênio (representando, por exemplo, um grupo éter

composto de grupos alifáticos, grupo éter composto de grupos aromáticos ou grupo éter composto de grupos alifáticos e grupos aromáticos, mas excluindo grupos contendo hidrogênio ativo tais como um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo metina terminal e um grupo OH alcóolico, um grupo carboxila, um grupo NH_2, um grupo NH, um grupo NOH, um grupo SH, um grupo SO_3H ou um grupo SOH),

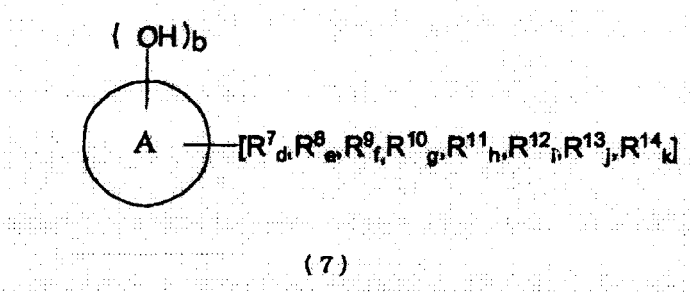
(iv) um átomo de halogênio, e

(v) um grupo composto de átomos selecionado dentre átomos de carbono, átomos de hidrogênio, átomos de oxigênio, átomos de nitrogênio, átomos de enxofre e átomos de halogênio (mas excluindo grupos contendo hidrogênio ativo tais como um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo metina terminal e um grupo OH alcóolico, um grupo carboxila, um grupo NH_2, um grupo NH, um grupo NOH, um grupo SH, um grupo SO_3H ou um grupo SOH).

Hidrogênio ativo refere-se a um átomo de hidrogênio ligado a oxigênio, enxofre ou nitrogênio (mas excluindo grupos hidroxila aromática). Embora grupos hidroxila aromática (grupos OH diretamente ligados a um grupo aromático) são incluídos na definição mencionada acima de hidrogênio ativo, uma vez que os grupos hidroxila aromática estão também contidos na composição da presente forma de realização e matérias primas de reação e não têm um efeito prejudicial em particular, grupos hidroxila aromática não estão incluídos em grupos contendo hidrogênio ativo a menos que especificamente indicado o contrário. Embora os "grupos contendo hidrogênio ativo" são frequentemente descritos em outras locais da invenção da presente aplicação, a definição mencionada acima se aplica a tais grupos.

Além disso, anel A é uma estrutura que contém pelo menos uma estrutura selecionada dentre o grupo consistindo de um anel benzeno, um anel naftaleno e um anel antraceno, e preferivelmente é um composto hidróxi

aromático representado pela seguinte fórmula (7):



(7)

(em que

anel A representa um anel aromático selecionado dentre um anel benzeno, um anel naftaleno e um anel antraceno, os grupos OH e grupos R^7 a R^{14} respectivamente representam grupos substituídos em locais arbitrários que mantém propriedades aromáticas de anel A, grupos R^7 a R^{14} podem respectivamente e independentemente substituir anel A, grupos R^7 a R^{14} podem ligar-se juntos para formar um anel com anel A, grupos R^7 a R^{14} respectivamente e independentemente representam um átomo de hidrogênio, um átomo de halogênio ou um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila, um grupo arila tendo um grupo hidróxi, um grupo aralquila e um grupo éter (grupo alquil éter substituído e/ou não substituído e/ou aril éter e/ou aralquil éter), e/ou um grupo ao qual um ou mais tipos de grupos selecionados dentre o grupo são ligados, e/ou um grupo ao qual um ou mais tipos de grupos selecionados dentre o grupo são ligados por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, e anel A e grupos R^7 a R^{14} são compostos de um número total integral de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50,

b representa um inteiro de 1 a 6, d, e, f, g, h, i, j e k representam inteiros a partir de 0 a 5, o valor de d + e + f + g + h + i + j + k representa um inteiro igual a 6-b no caso anel A é um anel benzeno, representa um inteiro igual a 8-b no caso anel A é um anel naftaleno, ou representa um inteiro igual a 10-b no caso anel A é um anel antraceno, e um grupo selecionado dentre grupos

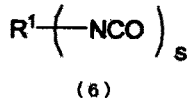
R^7 a R^{14} como descrito acima podem ser ciclicamente ligados um anel A por ligações carbono-carbono e/ou ligações de éter).

Em consideração de uso industrial, o composto hidróxi aromático representado por uma fórmula mencionada acima (7) é preferivelmente um composto hidróxi aromático em que um ou dois grupos hidroxila aromática são ligados um anel A (isto é, b = 1 ou 2), e mais preferivelmente um composto mono-hidróxi aromático em que um grupo hidroxila aromático é ligado um anel A, uma vez que eles tipicamente têm baixa viscosidade.

Além disso, uma vez que o composto hidróxi aromático é um composto que tem grupos ureído realizando a etapa (B) e passando por esterificação, forma um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado dos grupos ureído e o composto hidróxi aromático (isto é, um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em que o grupo O-aril que forma o O-aril éster de ácido carbâmico é formado pelo composto hidróxi aromático, enquanto a Porção de grupo ácido carbâmico N-substituído é formada a partir do composto tendo grupos ureído), enquanto no caso de efetuar a etapa (P), um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e o composto hidróxi aromático é formado a partir do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído realizando uma reação de transesterificação (isto é, o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído em que o grupo O-alquil éster do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído passou por transesterificação com o composto hidróxi aromático). O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é usado como um precursor de isocianato. Embora o método de produção de isocianato derivado do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído será subsequentemente descrito em detalhe, um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido pelo processo da presente forma de realização é preferivelmente termicamente decomposto em uma etapa (F) seguinte para

obter um isocianato representado pela seguinte fórmula (6), que é derivado do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, e uma composição de hidróxi aromático:

etapa (F): uma etapa de obter um isocianato e uma composição de hidróxi aromático a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído:



(6)

(em que

R^1 representa um grupo orgânico que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, e que é substituído por número s de grupos NCO, e s representa um inteiro de 1 a 10).

O método de produção contém decompor termicamente o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído para obter um composto hidróxi aromático e isocianato derivado do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Aqui, isocianato derivado do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído refere-se a um isocianato composto em que o grupo O-aril de ácido carbâmico (-NHCOOAr, em que Ar representa um grupo arila derivado do composto hidróxi aromático) do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é convertido para um grupo isocianato (-NCO). Em consideração da fórmula de reação, o composto hidróxi aromático formado neste tempo é um composto hidróxi aromático contido na composição de hidróxi aromático reagido com o composto tendo grupos ureído quando obtendo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Isto é, um composto hidróxi aromático representado pela fórmula (2), e preferivelmente pela fórmula (7), é formado como um subproduto junto com isocianato durante decomposição térmica do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Em um aspecto da presente forma de realização, embora dependendo do caso particular, o composto hidróxi aromático e isocianato são separados por destilação seguindo a etapa de

decomposição térmica, e o composto hidróxi aromático separado pode ser reciclado na forma de uma composição de hidróxi aromático que é reagido com o composto tendo grupos ureído. Isto é, este aspecto da presente forma de realização é um aspecto preferível em que a composição de hidróxi aromático obtida na etapa (F) é separada a partir de isocianato, e então usada reciclando para a etapa (A) e/ou a etapa (B), ou para a etapa (A) e/ou a etapa (R) e/ou a etapa (P).

Deste modo, em consideração do processo através da etapa de produção de isocianato em que a etapa (F) é realizada, é necessário considerar a separabilidade do composto hidróxi aromático servindo como uma matéria prima do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e do isocianato formado a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Embora seja difícil definir geralmente separabilidade, ela é definida com base na descoberta de que normalmente dois componentes a serem separados podem ser adequadamente separados por destilação industrialmente se os pontos de ebulição padrão destes estiverem 10°C ou mais distanciados. Deste modo, esta definição refere-se a um valor que é limitado por meios de separação correntemente conhecidos, e não é pretendido servir como uma base da presente forma de realização.

A seguinte Tabela (1) indica os pontos de ebulição padrão de compostos hidróxi aromático ou pontos de ebulição em uma pressão reduzida no caso em que sua medição é difícil em pressão normal. Embora a reatividade do composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático usada na presente forma de realização com um composto contendo um grupo ureído e/ou um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído (detalhes com relação a este O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído serão descritos a seguir) e/ou uréia é importante, o ponto de ebulição padrão é também um índice de seleção importante com relação à separação de cada componente. Como mostrado na seguinte Tabela (1), os tipos e números de substituintes, as locais

de substituintes e semelhantes têm uma influência considerável no ponto de ebulição do composto hidróxi aromático. Ponto de ebulição é uma propriedade física que é também dependente de forças intermoleculares, e é comumente conhecida entre pessoas versadas na técnica como não estando apta a ser definida pela estrutura de uma molécula simples. Deste modo, seleção de um composto hidróxi aromático de acordo com um importante aspecto da presente invenção na forma de ponto de ebulição padrão é realizada medindo ou investigando a estrutura e propriedades (ponto de ebulição padrão) do O-Ar éster de ácido carbâmico N-substituído desejado (os detalhes do quais serão descritos a seguir) e/ou isocianato. Medição de ponto de ebulição padrão pode ser realizada com métodos conhecidos, e pode ser realizada como rotina por um pesquisador versado no campo técnico relevante. Como foi descrito acima, é difícil definir separação de compostos hidróxi aromático usados na presente invenção com uma estrutura tal como uma fórmula geral, e o método pretendido da presente forma de realização não é para prever o ponto de ebulição padrão de um composto hidróxi aromático. Deste modo, uma pessoa versada na técnica está apta a efetuar a presente forma de realização referindo-se a ou medindo o ponto de ebulição padrão correspondendo ao composto usado como previamente descrito.

[Tabela 1]

Compostos hidróxi aromático	Ponto de ebulição °C (valores em parênteses indicam pressão durante medição, e a ausência de valores em parênteses significa que medição foi realizada em pressão normal)
Fenol	182
2-metilfenol	191
3-metilfenol	203
4-metilfenol	202
2,4-dimetilfenol	211
2,6-dimetilfenol	203

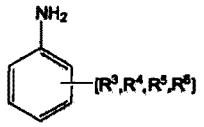
2,5-dimetilfenol	212
3,4-dimetilfenol	227
3,5-dimetifenol	222
2,4,6-trimetilfenol	220
4-propilfenol	232
2-propilfenol	225
2-(propan-2-il) fenol	212
4-(propan-2-il) fenol	212
3-(propan-2-il) fenol	228
2,6-dimetilfenol	219
4-butilfenol	138-139 (2,40 kPa)
4-pentilfenol	250
2-(2-metilbutan-2-il) fenol	92 (0,53 kPa)
2,4-bis(propan-2-il) fenol	249
2,6-bis(propan-2-il) fenol	256
2-(fenilmetil) fenol	312
3,5-dimetoxifenol	172 (2,27 kPa)
2,6-dimetoxifenol	167 (1,33 kPa)
2-etoxifenol	216
4-heptilfenol	156 (1,20 kPa)
4-octilfenol	150 (0,53 kPa) (lit,)
4-butoxifenol	278
4-(2,4,4-trimetilpentan-2-il) fenol	175 (4,00 kPa)
2,4-bis(2-metilbutan-2-il) fenol	170 (0,267 kPa)
Naftalen-2-ol	285
Naftalen-1-ol	278
Pirocatecol	245
Resorcinol	178 (2,13 kPa)
Hidroquinona	285
Pirogalol	309
2-bromofenol	195
3-bromofenol	236
4-bromofenol	235-236
2-clorofenol	175-176
3-clorofenol	214
4-clorofenol	220
4-cloro-2-metilfenol	220-225
2-cloro-4-metilfenol	195-196

Ao proporcionar uma explicação usando uma das presentes formas

de realização como um exemplo, uma amina primária orgânica representada por uma fórmula mencionada acima (3) e a uréia mencionada acima submetida a uma reação de ureidação em etapa (A) para obter um composto tendo grupos ureído indicados em fórmula (1), o composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) (e preferivelmente por fórmula (7)) são submetidos a uma reação de esterificação realizando a etapa (B) para obter um composto tendo um grupo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, e a etapa (F) é realizada usando o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído para produzir um composto hidróxi aromático e isocianato derivado do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Alternativamente, um composto hidróxi aromático e isocianato derivado do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído são produzidos por um método que compreende as etapas (A), (R), (P) e (F). Alternativamente, no caso a amina primária orgânica é uma monoamina primária orgânica aromática representada pela seguinte fórmula (5), uma etapa (C) seguinte é realizada após a etapa (B) ou a etapa (P) (os detalhes de etapa (C) serão subsequentemente descritos), e um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno ($-CH_2-$), é obtido a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido na etapa (B) ou a etapa (P), seguido por efetuar a etapa (F) para produzir um composto hidróxi aromático e isocianato derivado do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído:

etapa (C): uma etapa de obter O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno ($-CH_2-$), reagindo o O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com formaldeído ou um agente de reticulação de metileno, e grupos aromáticos de

reticulação derivados da monoamina primária orgânica aromática contida no O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com grupos metileno ($-CH_2-$):



(5)

(em que

pelo menos um local na posição orto e/ou posição para do grupo NH_2 de uma monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) não é substituída, grupos R^3 a R^6 respectivamente representam um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel, grupos R^3 a R^6 podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^3 a R^6 podem juntos ligar-se para formar um anel com um anel aromático, grupos R^3 a R^6 são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre grupos compostos de grupos em que um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono de grupos R^3 a R^6 é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e o número total de átomos de carbono que compõe a monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) é um inteiro de 6 a 13).

Além disso, embora o termo "O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído" é frequentemente usado no presente relatório, ele refere-se a "O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído ou O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído".

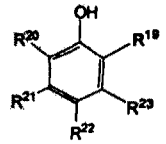
Deste modo, as estruturas do composto hidróxi aromático e isocianato a ser separado seguindo a reação de decomposição térmica são tais que o composto hidróxi aromático é um composto hidróxi aromático que compõe (ou está contido em) uma composição de hidróxi aromático usada

quando convertendo um composto tendo grupos ureído para um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, enquanto o outro produto na forma do isocianato é derivado de um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) ou uma amina primária orgânica representada por fórmula (3) (isto é, um isocianato é obtido tendo uma estrutura em que um grupo ureído ($-NHCONH_2$) do composto tendo grupos ureído é convertido para um grupo isocianato (-NCO), ou um grupo amino primário ($-NH_2$) da amina primária orgânica é convertida em um grupo isocianato (-NCO)).

Isto é, se os pontos de ebulição padrão de um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2), ou preferivelmente por fórmula (7), e um isocianato representado por fórmula (6) diferem por 10°C ou mais, o composto hidróxi aromático e o isocianato podem ser separados por técnicas correntemente conhecidas. Como foi previamente descrito, uma vez que isocianato representado por fórmula (6) obtida pelo método da presente forma de realização é produzido usando como materiais iniciais um composto tendo grupos ureído ou uma amina primária orgânica, o ponto de ebulição padrão do isocianato a ser produzido pode ser ponto de ebulição padrão de um isocianato em que todos os grupos ureído ou todos os grupos amino primários do composto tendo grupos ureído ou a amina primária orgânica são convertidos em grupos isocianato. Em um aspecto preferível, o composto tendo grupos ureído é um composto tendo grupos ureído que é obtido realizando a etapa (A). Isto é, um composto hidróxi aromático é preferível em que o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático difere por 10°C ou mais a partir do ponto de ebulição padrão de um isocianato tendo a estrutura em que todos dos grupos amino (grupos amino primários) da amina primária orgânica são convertidos em grupos isocianato.

Ademais, em consideração de uso industrial, um composto mono-hidróxi aromático tendo um anel benzeno facilmente adquirível para o

esqueleto deste é preferível. Exemplos preferíveis de tal composto mono-hidróxi aromático podem incluir compostos mono-hidróxi aromático representados pela seguinte fórmula (31):



(31)

(em que

R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22} e R^{23} são grupos independentemente selecionados a partir dos grupos mencionados acima R^7 a R^{14} (excluindo grupos arila tendo um grupo hidróxi), e o composto hidróxi aromático representado por fórmula (31) é um composto mono-hidróxi aromático em que o número de átomos de carbono é um inteiro de 6 a 50, isto é o número total de átomos de carbono de grupos R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22} e R^{23} é um inteiro de 0 a 44).

Dentre os compostos mono-hidróxi aromático representados pela fórmula mencionada acima (31), grupos R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22} e R^{23} são preferivelmente átomos de hidrogênio e/ou grupos respectivamente e independentemente selecionados a partir dos grupos indicados no seguinte (i) a (iii):

(i): um grupo em que o átomo na posição α (átomo ligado ao anel aromático) é um átomo de carbono, o número de átomos de carbono é a partir de 1 a 44, um grupo ligado ao átomo de carbono de posição α é um átomo de hidrogênio, grupo alquila tendo 1 a 43 átomos de carbono, grupo cicloalquila tendo 1 a 44 átomos de carbono, grupo alcóxi tendo 1 a 44 átomos de carbono, grupo alquil éter de polioxialquileno tendo 2 a 44 átomos de carbono, mas não tendo um grupo OH em uma terminação do mesmo, grupo arila tendo 6 a 43 átomos de carbono, grupo aralquila tendo 7 a 43 átomos de carbono ou grupo aralquilóxi tendo 7 a 19 átomos de carbono, e três grupos selecionados dentre grupos em que um ou mais tipos dos grupos acima são ligados são ligados ao

átomo de carbono,

(ii) um grupo arila em que o número de átomos de carbono é a partir de 1 a 44, o grupo arila é substituído por substituintes, e os substituintes são grupos arila que podem ser substituídos com um número inteiro a partir de 1 a 5 dos seguintes substituintes, os substituintes sendo selecionado dentre um átomo de hidrogênio, um grupo alquila tendo 1 a 38 átomos de carbono, um grupo cicloalquila tendo 4 a 38 átomos de carbono, um grupo alcóxi tendo 1 a 38 átomos de carbono, um grupo alquil éter de polioxialquileno tendo 2 a 38 átomos de carbono mas não tendo um grupo OH em uma terminação do mesmo, um grupo arila tendo 6 a 38 átomos de carbono, um grupo aralquila tendo 7 a 38 átomos de carbono, um grupo aralquilóxi tendo 7 a 38 átomos de carbono, e um grupo em que um ou mais tipos dos grupos acima são ligados,

(iii) um grupo em que o átomo na posição α (átomo ligado ao anel aromático) é um átomo de oxigênio, o número de átomos de carbono é a partir de 1 a 44, e um grupo ligado ao átomo de oxigênio de posição α é um grupo selecionado dentre um grupo alquila tendo 1 a 43 átomos de carbono, um grupo cicloalquila tendo 4 a 44 átomos de carbono, um grupo alcóxi tendo 1 a 44 átomos de carbono, um grupo alquil éter de polioxialquileno tendo 2 a 44 átomos de carbono, mas não tendo um grupo OH na terminação do mesmo, um grupo arila tendo 6 a 43 átomos de carbono, um grupo aralquila tendo 7 a 43 átomos de carbono, e um grupo em que um ou mais tipos dos grupos acima são ligados.

Além disso, embora o termo "átomo na posição α" é usado na fórmula mencionada acima (31), um "átomo na posição α" refere-se a um átomo que compõe os grupos R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22} e R^{23} que está adjacente a um átomo de carbono no anel de hidrocarboneto aromático ao qual os grupos R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22} e R^{23} são ligados. Exemplos destes R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22} e R^{23} podem incluir átomos de hidrogênio, grupos alquila e/ou grupos cicloalquila e/ou

grupos cicloalquila substituídos com um grupo alquila e/ou grupos alquila substituídos com um grupo cicloalquila tais como um grupo metila, um grupo etila, um grupo propila (incluindo isômeros), um grupo butil (incluindo isômeros), um grupo pentila (incluindo isômeros), um grupo hexila (incluindo isômeros), um grupo heptila (incluindo isômeros), um grupo octila (incluindo isômeros), um grupo nonila (incluindo isômeros), um grupo decila (incluindo isômeros), um grupo dodecila (incluindo isômeros), um octadecila (incluindo isômeros), grupo ciclopentila, grupo ciclo-hexila, grupo ciclo-heptila, grupo ciclooctila, bis(ciclo-hexil) alcano, grupo metilciclopentila (incluindo isômeros), grupo etilciclopentila (incluindo isômeros), grupo metilciclo-hexila (incluindo isômeros), grupo etilciclo-hexila (incluindo isômeros), grupo propilciclo-hexila (incluindo isômeros), grupo butilciclo-hexila (incluindo isômeros), grupo pentilciclo-hexila (incluindo isômeros), grupo hexilciclo-hexila (incluindo isômeros), grupo dimetilciclo-hexila (incluindo isômeros), grupo dietilciclo-hexila (incluindo isômeros) ou grupo dibutilciclo-hexila (incluindo isômeros); grupos alcóxi e/ou grupos cicloalcóxi e/ou grupos cicloalcóxi substituídos com um grupo alcóxi e/ou grupos alcóxi substituídos com um ciclogrupo alcóxi tais como um grupo metoxi, um grupo etoxi, grupo propóxi (incluindo isômeros), um grupo butilóxi (incluindo isômeros), um grupo pentilóxi (incluindo isômeros), um grupo hexilóxi (incluindo isômeros), um grupo heptilóxi (incluindo isômeros), um grupo octilóxi (incluindo isômeros), um grupo nonilóxi (incluindo isômeros), um grupo decilóxi (incluindo isômeros), um grupo dodecilóxi (incluindo isômeros), um octadecilóxi (incluindo isômeros), um grupo ciclopentilóxi (incluindo isômeros), um grupo ciclo-hexilóxi (incluindo isômeros), um grupo ciclo-heptilóxi (incluindo isômeros), um grupo ciclooctilóxi (incluindo isômeros), um grupo metilciclopentilóxi (incluindo isômeros), um etilciclopentilóxi (incluindo isômeros), um grupo metilciclo-hexilóxi (incluindo

isômeros), um etilciclo-hexilóxi (incluindo isômeros), um grupo propilciclo-hexilóxi (incluindo isômeros), um grupo butilciclo-hexilóxi (incluindo isômeros), um grupo pentilciclo-hexilóxi (incluindo isômeros), um grupo hexilciclo-hexilóxi (incluindo isômeros), um grupo dimetilciclo-hexilóxi (incluindo isômeros), um grupo dietilciclo-hexilóxi (incluindo isômeros) ou um grupo dibutilciclo-hexilóxi (incluindo isômeros); grupos arila substituídos ou não substituídos tais como um grupo fenila, um grupo metilfenila (incluindo isômeros), um grupo etilfenila (incluindo isômeros), um grupo propilfenila (incluindo isômeros), um grupo butilfenila (incluindo isômeros), um grupo pentilfenila (incluindo isômeros), um grupo hexilfenila (incluindo isômeros), um grupo heptilfenila (incluindo isômeros), um octilfenila (incluindo isômeros), um grupo nonilfenila (incluindo isômeros), um grupo decilfenila (incluindo isômeros), um grupo bifenila (incluindo isômeros), um grupo dimetilfenila (incluindo isômeros), um grupo dietilfenila (incluindo isômeros), um grupo dipropilfenila (incluindo isômeros), um grupo dibutilfenila (incluindo isômeros), um grupo dipentilfenila (incluindo isômeros), um grupo dihexilfenila (incluindo isômeros), um grupo diheptilfenila (incluindo isômeros), um grupo terfenila (incluindo isômeros), um grupo trimetilfenila (incluindo isômeros), um grupo trietilfenila (incluindo isômeros), um grupo tripropilfenila (incluindo isômeros) ou um grupo tributilfenila (incluindo isômeros); grupos arilóxi substituídos ou não substituídos tais como um grupo fenoxi, um grupo metilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo etilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo propilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo butilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo pentilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo hexilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo heptilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo octilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo nonilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo decilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo fenilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo dimetilfenóxi (incluindo isômeros),

um grupo dietilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo dipropilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo dibutilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo dipentilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo dihexilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo diheptilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo difenilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo trimetilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo trietilfenóxi (incluindo isômeros), um grupo tripropilfenóxi (incluindo isômeros) ou um grupo tributilfenóxi (incluindo isômeros); grupos aralquila substituídos ou não substituídos tais como um grupo fenilmetila, um grupo feniletila (incluindo isômeros), um grupo fenilpropila (incluindo isômeros), um grupo fenilbutila (incluindo isômeros), um grupo fenilpentila (incluindo isômeros), um grupo fenilhexila (incluindo isômeros), um grupo fenilheptila (incluindo isômeros), um grupo feniloctila (incluindo isômeros) ou um grupo fenilnonila (incluindo isômeros); grupos aralquilóxi tais como um grupo fenilmetoxi, um grupo feniletóxi (incluindo isômeros), um grupo fenilpropilóxi (incluindo isômeros), um grupo fenilbutilóxi (incluindo isômeros), um grupo fenilpentilóxi (incluindo isômeros), um grupo fenilhexilóxi (incluindo isômeros), um grupo fenilheptilóxi (incluindo isômeros), um grupo feniloctilóxi (incluindo isômeros) ou um grupo fenilnonilóxi (incluindo isômeros), e grupos compostos de grupos hidroxiarila e grupos alquila tais como um grupo hidroxifenila (incluindo isômeros), um grupo hidroxifenóxi (incluindo isômeros), um grupo hidroxifenilmetila (incluindo isômeros), um grupo hidroxifeniletila (incluindo isômeros) ou um grupo hidroxifenilpropila (incluindo isômeros).

Exemplos preferíveis de compostos mono-hidróxi aromático representados por uma fórmula mencionada acima (30) podem incluir os seguintes compostos: fenol, metilfenol (incluindo isômeros), etilfenol (incluindo isômeros), propilfenol (incluindo isômeros), butilfenol (incluindo isômeros), pentilfenol (incluindo isômeros), hexilfenol (incluindo isômeros),

heptilfenol (incluindo isômeros), octilfenol (incluindo isômeros), nonilfenol (incluindo isômeros), decilfenol (incluindo isômeros), dodecilfenol (incluindo isômeros), octadecilfenol (incluindo isômeros), dimetilfenol (incluindo isômeros), dietilfenol (incluindo isômeros), dipropilfenol (incluindo isômeros), dibutilfenol (incluindo isômeros), dipentilfenol (incluindo isômeros), dihexilfenol (incluindo isômeros), diheptilfenol (incluindo isômeros), dioctilfenol (incluindo isômeros), dinonilfenol (incluindo isômeros), didecilfenol (incluindo isômeros), didodecilfenol (incluindo isômeros), dioctadecilfenol (incluindo isômeros), trimetilfenol (incluindo isômeros), trietilfenol (incluindo isômeros), tripropilfenol (incluindo isômeros), tributilfenol (incluindo isômeros), tripentilfenol (incluindo isômeros), trihexilfenol (incluindo isômeros), triheptilfenol (incluindo isômeros), trioctilfenol (incluindo isômeros), trinonilfenol (incluindo isômeros), tridecilfenol (incluindo isômeros), tridodecilfenol (incluindo isômeros), trioctadecilfenol (incluindo isômeros), (metoximetil) fenol (incluindo isômeros), (etoximetil) fenol (incluindo isômeros), (propoximetil) fenol (incluindo isômeros), (butiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (pentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (octiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (noniloximetil) fenol (incluindo isômeros), (deciloximetil) fenol (incluindo isômeros), (dodeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), (octadeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), (ciclopentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (ciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (ciclo-heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (ciclooctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (metilciclopentiloximeti) fenol (incluindo isômeros), (etilciclopentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (metilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (etilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (propilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (butilciclo-

hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (pentilciclo- hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (hexilciclo- hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (dimetilciclo- hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (dietilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (dibutilciclo- hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenoximetil) fenol, (metilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (etilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (propilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (butilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (pentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (hexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (heptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (octilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (nonilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (decilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dipropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dibutilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dipentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dihexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (diheptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (difenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (trimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (trietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (tripropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (tributilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetoximetil) fenol (incluindo isômeros), (feniletoximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilpropiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilbutiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilpentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilhexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilheptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (feniloctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilnoniloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(metoximetil) fenol, di(etoximetil) fenol, di(propoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(butiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(pentiloximetil) fenol (incluindo

isômeros), di(hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(octiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(noniloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(deciloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(dodeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(octadeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(ciclopentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(ciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(ciclo-heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(ciclooctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(metilciclopentiloximeti) fenol (incluindo isômeros), di(etilciclopentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(metilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(etilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(propilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(butilciclo- hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(pentilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(hexilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dimetilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenoximetil) fenol, di(metilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(etilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(propilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(butilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(pentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(hexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(heptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(octilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(nonilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(decilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dipropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dipentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dihexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(diheptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros),

bis(difenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(trimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(trietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(tripropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(tributilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(feniletoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilpropiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilbutiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilpentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilhexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilheptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(feniloctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilnoniloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(metoximetil) fenol, tri(etoximetil) fenol, tri(propoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(butiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(pentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(octiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(noniloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(deciloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(dodeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(octadeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(ciclopentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(ciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(ciclo-heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(ciclooctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(metilciclopentiloximeti) fenol (incluindo isômeros), tri(etilciclopentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(metilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(etilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(propilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(butilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(pentilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(hexilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dimetilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenoximetil) fenol, tri(metilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros),

tri(etilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(propilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(butilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(pentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(hexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(heptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(octilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(nonilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(decilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dipropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dipentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dihexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(diheptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(difenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(trimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(trietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(tripropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(tributilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilmetoximetil) fenol, tri(feniletoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilpropiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilbutiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilpentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilhexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilheptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(feniloctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilnoniloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetil) fenol (incluindo isômeros), ((metilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((etilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((propilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((butilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((pentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((hexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((heptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((octilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((nonilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((decilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((bifenil)metil) fenol (incluindo isômeros),

((dimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dipropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dibutilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dipentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dihexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((diheptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((terfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((trimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((trietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((tripropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((tributilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilmetil) fenol (incluindo isômeros), di((metilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((etilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((propilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((butilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((pentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((hexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((heptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((octilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((nonilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((decilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((bifenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dipropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dibutilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dipentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dihexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((diheptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((terfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((trimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((trietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((tripropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((tributilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilmetil) fenol (incluindo isômeros), tri((metilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((etilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((propilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((butilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((pentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((hexilfenil)metil) fenol

(incluindo isômeros), tri((heptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((octilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((nonilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((decilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((bifenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dipropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dibutilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dipentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dihexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((diheptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((terfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((trimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((trietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((tripropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((tributilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), feniletilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-propilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-butilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-pentilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-hexilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-heptilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-octilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-nonilfenol (incluindo isômeros), metoxifenol (incluindo isômeros), etoxifenol (incluindo isômeros), propiloxifenol (incluindo isômeros), butiloxifenol (incluindo isômeros), pentiloxifenol (incluindo isômeros), hexiloxifenol (incluindo isômeros), heptiloxifenol (incluindo isômeros), octiloxifenol (incluindo isômeros), noniloxifenol (incluindo isômeros), deciloxifenol (incluindo isômeros), dodeciloxifenol (incluindo isômeros), octadeciloxifenol (incluindo isômeros), ciclopentiloxifenol (incluindo isômeros), ciclo-hexiloxifenol (incluindo isômeros), ciclo-heptiloxifenol (incluindo isômeros), ciclooctiloxifenol (incluindo isômeros), (metilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), (etilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), (metilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (etilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (propilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (butilciclo-hexiloxi) fenol

(incluindo isômeros), (pentilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (hexilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (dimetilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (dietilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (dibutilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), fenoxifenol, (metilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (etilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (propilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (butilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (pentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (hexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (heptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (octilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (nonilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (decilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bifeniloxifenol (incluindo isômeros), (dimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (dietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (dipropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (dibutilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (dipentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (dihexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (diheptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), terfeniloxifenol (incluindo isômeros), (trimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (trietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (tripropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (tributilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetiloxi) fenol, (feniletiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilpropiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilbutiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilpentiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilhexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilheptiloxi) fenol (incluindo isômeros), (feniloctiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilnoniloxi) fenol (incluindo isômeros), dimetoxifenol (incluindo isômeros), dietoxifenol (incluindo isômeros), dipropiloxifenol (incluindo isômeros), dibutiloxifenol (incluindo isômeros), dipentiloxifenol (incluindo isômeros), dihexiloxifenol (incluindo isômeros), diheptiloxifenol (incluindo isômeros), dioctiloxifenol (incluindo isômeros), dinoniloxifenol (incluindo isômeros), dideciloxifenol (incluindo isômeros), didodeciloxifenol (incluindo isômeros), dioctadeciloxifenol (incluindo

isômeros), diciclopentiloxifenol (incluindo isômeros), diciclo-hexiloxifenol (incluindo isômeros), diciclo-heptiloxifenol (incluindo isômeros), diciclooctiloxifenol (incluindo isômeros), di(metilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(etilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(metilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(etilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(propilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(butilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(pentilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(hexilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dimetilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), feniloxifenol, di(metilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(etilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(propilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(butilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(pentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(hexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(heptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(octilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(nonilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(decilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), dibifeniloxifenol (incluindo isômeros), bis(dimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dipropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dipentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dihexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(diheptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), diterfeniloxifenol (incluindo isômeros), di(trimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(trietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(tripropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(tributilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetiloxi) fenol, di(feniletiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilpropiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilbutiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilpentiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilhexiloxi) fenol (incluindo isômeros),

di(fenilheptiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(feniloctiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilnoniloxi) fenol (incluindo isômeros), trimetoxifenol (incluindo isômeros), trietoxifenol (incluindo isômeros), tripropiloxifenol (incluindo isômeros), tributiloxifenol (incluindo isômeros), tripentiloxifenol (incluindo isômeros), trihexiloxifenol (incluindo isômeros), triheptiloxifenol (incluindo isômeros), trioctiloxifenol (incluindo isômeros), trinoniloxifenol (incluindo isômeros), trideciloxifenol (incluindo isômeros), tridodeciloxifenol (incluindo isômeros), trioctadeciloxifenol (incluindo isômeros), triciclopentiloxifenol (incluindo isômeros), triciclo-hexiloxifenol (incluindo isômeros), triciclo-heptiloxifenol (incluindo isômeros), tricicloctiloxifenol (incluindo isômeros), tri(metilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(etilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(metilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(etilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(propilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(butilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(pentilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(hexilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dimetilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dietilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dibutilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), feniloxifenol, tri(metilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(etilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(propilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(butilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(pentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(hexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(heptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(octilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(nonilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(decilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tribifeniloxifenol (incluindo isômeros), tri(dimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dipropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dibutilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dipentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dihexilfeniloxi) fenol

(incluindo isômeros), tri(diheptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), triterfeniloxifenol (incluindo isômeros), tri(trimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(trietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(tripropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(tributilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetiloxi) fenol, tri(feniletiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilpropiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilbutiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilpentiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilhexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilheptiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(feniloctiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilnoniloxi) fenol (incluindo isômeros), fenilfenol (incluindo isômeros), hidroxifenila fenol (incluindo isômeros), hidroxifenóxi fenol (incluindo isômeros), hidroxifenilmetil fenol (incluindo isômeros), hidroxifeniletil fenol (incluindo isômeros), hidroxifenilpropil fenol, naftol (incluindo isômeros), fenoxifenol (incluindo isômeros), e difenoxifenol (incluindo isômeros).

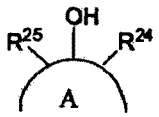
Exemplos preferíveis dos compostos mono-hidróxi aromático acima mencionados podem incluir aqueles em que pelo menos dois dos grupos R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22} e R^{23} são átomos de hidrogênio devido à facilidade de transferência, e mais preferivelmente o número de átomos de carbono que compõe os grupos R^{19}, R^{20}, R^{21}, R^{22} e R^{23} é a partir de 0 a 13. Ainda mais preferivelmente, o composto mono-hidróxi aromático é um composto mono-hidróxi aromático em que os grupos R^{20}, R^{21}, R^{22} e R^{23} são grupos tendo 0 a 9 átomos de carbono que são átomos de hidrogênio selecionados, grupos alquila linear ou ramificado, grupos cicloalquila, grupos arila substituídos ou não substituídos, grupos alcóxi linear ou ramificados, grupos arilóxi substituídos ou não substituídos e grupos aralquila substituídos ou não substituídos.

O seguinte provê uma explicação de um composto mono-hidróxi aromático ativo. Um composto hidróxi aromático representado por uma

fórmula mencionada acima (2) e/ou fórmula (7) e/ou fórmula (31) podem ser preferivelmente usados como um composto hidróxi aromático que compõe uma composição aromática usada em uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído. Além disso, pode também ser preferivelmente usados como o composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático usada durante produção de um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo com um composto tendo grupos ureído e/ou um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído. No entanto, o último composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático usada durante produção de um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é um composto que compõe um grupo O-aril éster em um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo com um composto tendo grupos ureído e/ou um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído. No caso de usar a composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído como uma matéria prima de um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, no caso de produzir um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído usando um composto tendo grupos ureído como uma matéria prima, ou quando usando como uma matéria prima de um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído seguido por produzir um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, embora o composto hidróxi aromático esteja incluído na fórmula mencionada acima (2) e/ou fórmula (7) e/ou fórmula (31), um composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (32) é usado particularmente preferivelmente (um composto hidróxi aromático representado por fórmula (32) é frequentemente referido como um "composto hidróxi aromático ativo" no presente relatório a fim de expressar a facilidade por qual a reação ocorre). O composto hidróxi aromático ativo representado pela seguinte fórmula (32) pode ser usado sozinho como uma composição de hidróxi aromático usada em uma composição para transferência e armazenamento de

um composto tendo grupos ureído, ou pode ser usado como um tipo de composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático. Além disso, o composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (32) pode ser usado sozinho como uma composição de hidróxi aromático para obter um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo com um composto tendo grupos ureído e/ou um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, ou pode ser usado como um tipo de composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático. Naturalmente, uma pluralidade de compostos hidróxi aromático ativos representados pela seguinte fórmula (32) pode também ser usada em cada dos casos descrito acima.

O composto mono-hidróxi aromático ativo é representado pela seguinte fórmula (32):



(32)

(em que

anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo aromático substituído por número b de grupos hidróxi em locais arbitrários que mantém propriedades aromáticas, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e pode ser substituído por outros substituintes, e um número inteiro de 1 a 6 grupos OH representado por fórmula (32) são substituídos em um anel aromático contido no anel A (isto é, a fórmula (32) constitui uma porção do anel A, e um número inteiro de 1 a 6 estruturas em que o grupo R^{24} acima mencionado, grupo OH e grupo R^{25} adjacentes estão respectivamente presentes no anel A).

R^{24} e R^{25} são grupos ligados ao anel aromático em que o grupo hidróxi é ligado, e que são ligados a um átomo de carbono adjacente ao átomo

de carbono em que o grupo hidróxi é ligado. Um número inteiro de 1 a 6 grupos hidróxi são ligados um anel A, e deste modo, um número inteiro de 1 a 6 de R^{24} e R^{25} são respectivamente ligados um anel A. um composto hidróxi aromático representado por fórmula (32) é um composto hidróxi aromático que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50.

Um substituinte que substitui um grupo aromático de um composto hidróxi aromático representado por fórmula (32) acima (enquanto grupos R^{24} e R^{25} serão subsequentemente explicados em detalhe) é selecionado dentre o grupo consistindo de um átomo de hidrogênio, um átomo de halogênio, um grupo alifático, um grupo aromático e um grupo alifático em que um grupo aromático é ligado, é um grupo composto de um grupo hidrocarboneto acíclico ou um grupo hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto monocíclico, um grupo hidrocarboneto policíclico condensado, um grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, um grupo espiro-hidrocarboneto, um grupo hidrocarboneto de montagem de anel, um grupo hidrocarboneto cíclico tendo uma cadeia lateral, um grupo heterocíclico, um grupo espiro heterocíclico, um grupo de anel hetero-reticulado ou um grupo heterocíclico), um grupo ligado a partir de um ou mais tipos de grupos selecionados a partir dos grupos hidrocarboneto acíclico e grupos hidrocarboneto cíclico mencionados acima, e grupos em que os grupos mencionados acima são ligados através de uma ligação covalente com um átomo de não metal específico (carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício). Além disso, uma ligação covalente com um átomo de não metal específico (carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício) como descrito acima é em um estado em que os grupos mencionados acima são ligados por uma ligação covalente com, por exemplo, grupos representados por uma fórmula mencionada acima (8) a (11) e (13) a (16).

Dentre tais substituintes, exemplos de substituintes que podem ser

preferivelmente usados na presente forma de realização em consideração de menor suscetibilidade para a ocorrência de reações laterais podem incluir grupos selecionados dentre o grupo consistindo de grupo hidrocarboneto acíclico e grupos hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto monocíclico, um grupo hidrocarboneto policíclico condensado, um grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, um grupo espiro-hidrocarboneto, um grupo hidrocarboneto de montagem de anel ou um grupo hidrocarboneto cíclico tendo uma cadeia lateral), e grupos ligados a pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir deste grupo (grupos mutuamente substituídos).

Além disso, no caso de transferir uma composição contendo um composto tendo grupos ureído em uma temperatura elevada, ou no caso de realizar uma reação para obter um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e/ou um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático em uma temperatura elevada, o anel A do composto hidróxi aromático é preferivelmente composto de um grupo tendo pelo menos um substituinte inativo (incluindo átomos de hidrogênio) em adição ao grupo aromático e o grupo hidróxi ligado ao grupo aromático (aqui, um substituinte inativo refere-se a um grupo em que o substituinte inativo não contém um hidrogênio ativo como previamente descrito, embora possa ter um grupo hidroxila aromático).

Para prover uma explicação mais detalhada do substituinte, um composto hidróxi aromático representado por fórmula (32) é um composto hidróxi aromático tendo pelo menos um substituinte selecionado dentre o grupo de substituintes explicados no seguinte (i) a (v) em adição ao grupo aromático e o grupo hidróxi ligado ao grupo aromático (enquanto grupos R^{24} e R^{25} serão subsequentemente explicados em detalhe).

(i) um átomo de hidrogênio,

(ii) um grupo composto de átomos de carbono e átomos de

hidrogênio (que pode também formar um estrutura de anel condensado por ligação com anel A),

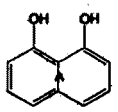
(iii) um grupo composto de átomos de carbono, átomos de hidrogênio e átomos de oxigênio (representando, por exemplo, um grupo éter composto de grupos alifáticos, um grupo éter composto de grupos aromáticos ou um grupo éter composto de grupos alifáticos e grupos aromáticos, mas excluindo grupos contendo hidrogênio ativo tais como um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo metina terminal e um grupo OH alcóolico, um grupo carboxila, um grupo NH_2, um grupo NH, um grupo NOH, um grupo SH, um grupo SO_3H ou um grupo SOH),

(iv) um átomo de halogênio, e

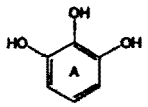
(v) um grupo composto de átomos selecionado dentre átomos de carbono, átomos de hidrogênio, átomos de oxigênio, átomos de nitrogênio, átomos de enxofre e átomos de halogênio (mas excluindo grupos contendo hidrogênio ativo tais como um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo metina terminal e um grupo OH alcóolico, um grupo carboxila, um grupo NH_2, um grupo NH, um grupo NOH, um grupo SH, um grupo SO_3H ou um grupo SOH).

R^{24} e R^{25} respectivamente e independentemente representam quaisquer dos grupos definidos no seguinte (i) a (v), e R^{24} e R^{25} podem ainda formar uma estrutura de anel condensado por ligação com anel A. No caso o relacionamento entre anel A e o grupo hidroxila na fórmula mencionada acima (32), por exemplo, é uma estrutura mostrada na seguinte fórmula (33) ou fórmula (34), embora o número de R^{24} e R^{25} ligado a um carbono adjacente ao grupo OH ligado ao grupo aromático que compõe anel A pode frequentemente não coincidir com o número dos grupos OH, na estrutura representada pela seguinte fórmula (33), anel A pode ser uma porção de anel mostrada no lado direito da seguinte fórmula (35), enquanto R^{25} pode formar uma estrutura de

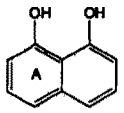
anel por ligação com anel A. No caso de fórmula (34), o grupo hidroxila aromático ligado um anel A é o grupo OH de centro, enquanto os grupos OH adjacentes podem ser grupos R^{24} e R^{25}, respectivamente:



(33)



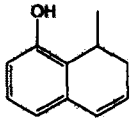
(34)



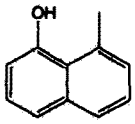
(35)

(i) um átomo de hidrogênio,

(ii) um grupo composto de átomos de carbono e átomos de hidrogênio (que pode também formar uma estrutura de anel condensado por ligação com anel A), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{24} e R^{25} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono, e o átomo de carbono é um átomo de carbono primário ou secundário (isto é, representando um átomo de carbono de um grupo metila ou átomo de carbono que forma uma ligação de $-CH_2-$), desde que no caso o R^{24} e/ou R^{25} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A e o anel condensado tem seis membros ou menos, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário como um, por exemplo, o caso da seguinte fórmula (36) ou fórmula (37), e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla ou ligação tripla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{24} e R^{25} que é ligado ao anel aromático de anel A) também, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário,



(36)



(37)

(iii) um grupo composto de átomos de carbono, átomos de hidrogênio e átomos de oxigênio (representando, por exemplo, um grupo éter composto de grupos alifáticos, um grupo éter composto de grupos aromáticos ou um grupo éter composto de grupos alifáticos e grupos aromáticos, mas não tendo um grupo OH alcóolico, um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo carboxila ou um grupo metina na terminação do mesmo), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{24} e R^{25} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono ou átomo de oxigênio, e no caso de um átomo de carbono, o átomo de carbono é um átomo de carbono primário ou secundário (isto é, um átomo de carbono de um grupo metila ou um átomo de carbono que forma uma ligação $-CH_2-$), desde que no caso o R^{24} e/ou R^{25} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A e o anel condensado tem seis membros ou menos, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário, e no caso em que átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla ou ligação tripla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{24} e R^{25} que é ligado ao anel aromático de anel A) também, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário,

(iv) um átomo de halogênio,

(v) um grupo composto de átomos selecionado dentre átomos de carbono, átomos de hidrogênio, átomos de oxigênio, átomos de nitrogênio, átomos de enxofre e átomos de halogênio (mas excluindo grupos contendo hidrogênio ativo tais como um grupo OH alcóolico, um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo carboxila, um grupo metina terminal, um grupo NH_2, um grupo NH, um grupo NOH, um grupo SH, um grupo SO_3H ou um grupo SOH), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{24} e R^{25} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono, átomo de oxigênio ou átomo de enxofre, no caso de um átomo de carbono, o átomo de carbono é um átomo de

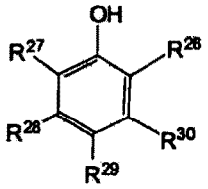
carbono primário ou secundário (isto é, um átomo de carbono de um grupo metila ou um átomo de carbono que forma uma ligação $-CH_2-$), e no caso de um átomo de enxofre, o átomo de enxofre é um átomo de enxofre divalente (isto é, um átomo de enxofre que forma uma ligação -S-), desde que no caso o R^{24} e/ou R^{25} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A e o anel condensado tem seis membros ou menos, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário, e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla ou ligação tripla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{24} e R^{25} que é ligado ao anel aromático de anel A) também, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário.

Embora o termo "hidrogênio ativo" é usado aqui, hidrogênio ativo refere-se a um átomo de hidrogênio ligado a oxigênio, enxofre ou nitrogênio. No entanto, grupos hidroxila aromática são excluídos. Embora grupos hidroxila aromática (grupos OH diretamente ligados a um grupo aromático) também constituam hidrogênio ativo, uma vez que os grupos hidroxila aromática estão também contidos na composição da presente forma de realização e matérias primas de reação e não tem um efeito prejudicial, grupos hidroxila aromática não estão incluídos em grupos contendo hidrogênio ativo a menos que especificamente indicado o contrário. Embora os "grupos contendo hidrogênio ativo" são frequentemente descritos em outras locais da presente forma de realização, a definição mencionada acima se aplica a tais grupos. Tal hidrogênio ativo é altamente reativo, e reage com a amina primária orgânica, uréia composto e semelhantes usados na presente forma de realização bem como com compostos tendo grupos ureído, O-(R^2 ou aril) ésteres de ácido carbâmico N-substituído e semelhantes formados na presente forma de realização resultando na formação de subprodutos de reação, assim tornando-o indesejável.

Além disso, anel A é preferivelmente uma estrutura que contém pelo menos uma estrutura selecionada dentre o grupo consistindo de um anel benzeno, um anel naftaleno e um anel antraceno. Em consideração do uso industrial, o composto hidróxi aromático ativo representado por uma fórmula mencionada acima (32) é preferivelmente um composto mono-hidróxi aromático em que um ou dois grupos hidroxila aromática são ligados um anel A (isto é, b = 1 ou 2), e mais preferivelmente um composto mono-hidróxi aromático em que um grupo hidroxila aromático é ligado um anel A, uma vez que eles tipicamente têm baixa viscosidade.

Como foi previamente descrito, um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2), (7), (31) ou (32) é formada como um subproduto junto com isocianato durante decomposição térmica do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído quando realizando a etapa (F) (frequentemente referida como a etapa de decomposição térmica, decomposição térmica ou durante decomposição térmica). Em um aspecto da presente forma de realização, embora dependendo do caso, o composto hidróxi aromático e isocianato são separados por destilação seguindo a etapa de decomposição térmica, e o composto hidróxi aromático separado pode ser reciclado na forma da composição de hidróxi aromático da presente forma de realização. Separação é realizada usando ponto de ebulição padrão como um indicador, e o método é selecionado de acordo com a definição previamente descrita.

Ademais, em consideração do uso industrial, o composto hidróxi aromático ativo é preferivelmente um composto mono-hidróxi aromático facilmente adquirível. Um exemplo preferível de tal composto mono-hidróxi aromático é um composto mono-hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (38):



(38)

(em que

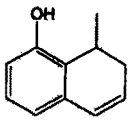
R^{28}, R^{29} e R^{30} são grupos respectivamente e independentemente selecionados a partir dos grupos mencionados acima R^7 a R^{14} (excluindo grupos arila tendo um grupo hidróxi), grupos R^{26} e R^{27} são grupos respectivamente e independentemente selecionados a partir dos grupos mencionados acima R^{24} e R^{25}, e o composto hidróxi aromático representado por fórmula (38) é um composto mono-hidróxi aromático tendo um número inteiro de 6 a 50 átomos de carbono, desde que o número total de átomos de carbono de grupos R^{26}, R^{27}, R^{28}, R^{29} e R^{30} é um inteiro de 0 a 44, e R^{26} e R^{27} são respectivamente e independentemente qualquer grupo definido como os seguintes (i) a (iii).

R^{26} e R^{27} são grupos respectivamente e independentemente selecionados a partir dos grupos mencionados acima R^{24} e R^{25}, e são respectivamente e independentemente qualquer grupo definido como o seguinte (i) a (iii):

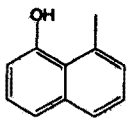
(i) um átomo de hidrogênio,

(ii) um grupo composto de átomos de carbono e átomos de hidrogênio (que pode também formar uma estrutura de anel por ligação com anel A), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{26} e R^{27} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono, e o átomo de carbono é um átomo de carbono primário ou secundário (isto é, representando um átomo de carbono de um grupo metila ou átomo de carbono que forma uma ligação $-CH_2-$), desde que no caso o R^{26} e/ou R^{27} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com um anel aromático e o anel condensado tem seis membros ou menos, o carbono na posição α pode ser um

átomo de carbono terciário ou quaternário como, por exemplo, no caso da seguinte fórmula (36) ou fórmula (37), e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla ou ligação tripla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{26} e R^{27} que é ligado ao anel aromático de anel A) também, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário,



(36)



(37)

(iii) um grupo composto de átomos de carbono, átomos de hidrogênio e átomos de oxigênio (representando, por exemplo, um grupo éter composto de grupos alifáticos, um grupo éter composto de grupos aromáticos ou um grupo éter composto de grupos alifáticos e grupos aromáticos, mas não tendo um grupo OH alcóolico, um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo carboxila ou um grupo metina na terminação do mesmo), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{26} e R^{27} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono ou um átomo de oxigênio, e no caso de um átomo de carbono, o átomo de carbono é um átomo de carbono primário ou secundário (isto é, um átomo de carbono de um grupo metila ou um átomo de carbono que forma uma ligação $-CH_2-$), desde que no caso o R^{26} e/ou R^{27} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado e o anel condensado tem seis membros ou menos, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário, e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla ou ligação tripla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{26} e R^{27} que é ligado ao anel aromático de anel A) também, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário.

Compostos mono-hidróxi aromático ativos em que o R^{26} e o R^{27} são átomos de hidrogênio são preferíveis, e exemplos de tais compostos

mono-hidróxi aromático podem incluir fenol, metilfenol (incluindo isômeros), etilfenol (incluindo isômeros), 2-n-propilfenol (incluindo isômeros), 2-n-butilfenol (incluindo isômeros), 2-n-pentilfenol (incluindo isômeros), 2-n-hexilfenol (incluindo isômeros), 2-n-heptilfenol (incluindo isômeros), 2-n-octilfenol (incluindo isômeros), 2-n-nonilfenol (incluindo isômeros), 2-n-decilfenol (incluindo isômeros), 2-n-dodecilfenol (incluindo isômeros), 2-n-octadecilfenol (incluindo isômeros), 3-propilfenol (incluindo isômeros), 3-butilfenol (incluindo isômeros), 3-pentilfenol (incluindo isômeros), 3-hexilfenol (incluindo isômeros), 3-heptilfenol (incluindo isômeros), 3-octilfenol (incluindo isômeros), 3-nonilfenol (incluindo isômeros), 3-decilfenol (incluindo isômeros), 3-dodecilfenol (incluindo isômeros), 3-octadecilfenol (incluindo isômeros), 4-propilfenol (incluindo isômeros), 4-butilfenol (incluindo isômeros), 4-pentilfenol (incluindo isômeros), 4-hexilfenol (incluindo isômeros), 4-heptilfenol (incluindo isômeros), 4-octilfenol (incluindo isômeros), 4-nonilfenol (incluindo isômeros), 4-decilfenol (incluindo isômeros), 4-dodecilfenol (incluindo isômeros), 4-octadecilfenol (incluindo isômeros), dimetilfenol (incluindo isômeros), dietilfenol (incluindo isômeros), di(n-propil) fenol (incluindo isômeros), di(n-butil) fenol (incluindo isômeros), di(n-pentil) fenol (incluindo isômeros), di(n-hexil) fenol (incluindo isômeros), di(n-heptil) fenol (incluindo isômeros), di(n-octil) fenol (incluindo isômeros), di(n-nonil) fenol (incluindo isômeros), di(n-decil) fenol (incluindo isômeros), di(n-dodecil) fenol (incluindo isômeros), di(n-octadecil) fenol (incluindo isômeros), trimetilfenol (incluindo isômeros), trietilfenol (incluindo isômeros), tri(n-propil) fenol (incluindo isômeros), tri(n-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(n-pentil) fenol (incluindo isômeros), tri(n-hexil) fenol (incluindo isômeros), tri(n-heptil) fenol (incluindo isômeros), tri(n-octil) fenol (incluindo isômeros), tri(n-nonil) fenol (incluindo isômeros), tri(n-decil) fenol (incluindo isômeros), tri(n-dodecil) fenol (incluindo isômeros),

tri(n-octadecil) fenol (incluindo isômeros), (metoximetil) fenol, (etoximetil) fenol, (propoximetil) fenol (incluindo isômeros), (butiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (pentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (octiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (noniloximetil) fenol (incluindo isômeros), (deciloximetil) fenol (incluindo isômeros), (dodeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), (octadeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), (ciclopentiloximetil) fenol, (ciclo-hexiloximetil) fenol, (ciclo-heptiloximetil) fenol, (ciclooctiloximetil) fenol, (metilciclopentiloximeti) fenol (incluindo isômeros), (etilciclopentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (metilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (etilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (propilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (butilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (pentilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (hexilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (dimetilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (dietilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (dibutilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenoximetil) fenol, (metilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (etilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (propilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (butilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (pentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (hexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (heptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (octilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (nonilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (decilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dipropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dibutilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dipentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (dihexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros),

(diheptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (difenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (trimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (trietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (tripropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (tributilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetoximetil) fenol (incluindo isômeros), (feniletoximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilpropiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilbutiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilpentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilhexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilheptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (feniloctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilnoniloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(metoximetil) fenol, di(etoximetil) fenol, di(propoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(butiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(pentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(octiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(noniloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(deciloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(dodeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(octadeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(ciclopentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(ciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(ciclo-heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(ciclooctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(metilciclopentiloximeti) fenol (incluindo isômeros), di(etilciclo pentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(metilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(etilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(propilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(butilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(pentilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(hexilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dimetilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenoximetil) fenol, di(metilfenoximetil) fenol

(incluindo isômeros), di(etilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(propilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(butilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(pentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(hexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(heptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(octilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(nonilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(decilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dipropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dipentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dihexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(diheptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(difenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(trimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(trietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(tripropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(tributilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetoximetil) fenol, di(feniletoximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilpropiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilbutiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilpentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilhexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilheptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(feniloctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilnoniloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(metoximetil) fenol, tri(etoximetil) fenol, tri(propoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(butiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(pentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(octiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(noniloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(deciloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(dodeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(octadeciloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(ciclopentiloximetil) fenol

(incluindo isômeros), tri(ciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(ciclo-heptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(ciclooctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(metilciclopentiloximeti) fenol (incluindo isômeros), tri(etilciclopentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(metilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(etilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(propilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(butilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(pentilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(hexilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dimetilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilciclo-hexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenoximetil) fenol, tri(metilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(etilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(propilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(butilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(pentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(hexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(heptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(octilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(nonilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(decilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dipropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dipentilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(dihexilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(diheptilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), bis(difenilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(trimetilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(trietilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(tripropilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(tributilfenoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilmetoximetil) fenol, tri(feniletoximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilpropiloximetil) fenol (incluindo isômeros),

tri(fenilbutiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilpentiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilhexiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilheptiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(feniloctiloximetil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilnoniloximetil) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetil) fenol (incluindo isômeros), ((metilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((etilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((propilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((butilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((pentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((hexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((heptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((octilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((nonilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((decilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((bifenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dipropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dibutilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dipentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((dihexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((diheptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((terfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((trimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((trietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((tripropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), ((tributilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di(fenilmetil) fenol (incluindo isômeros), di((metilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((etilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((propilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((butilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((pentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((hexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((heptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((octilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((nonilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((decilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((bifenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros),

di((dietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dipropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dibutilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dipentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((dihexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((diheptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((terfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((trimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((trietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((tripropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), di((tributilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilmetil) fenol (incluindo isômeros), tri((metilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((etilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((propilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((butilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((pentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((hexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((heptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((octilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((nonilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((decilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((bifenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dipropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dibutilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dipentilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((dihexilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((diheptilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((terfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((trimetilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((trietilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((tripropilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), tri((tributilfenil)metil) fenol (incluindo isômeros), feniletilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-propilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-butilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-pentilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-hexilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-heptilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-octilfenol (incluindo isômeros), fenil-n-nonilfenol (incluindo isômeros), metoxifenol

(incluindo isômeros), etoxifenol (incluindo isômeros), propiloxifenol (incluindo isômeros), butiloxifenol (incluindo isômeros), pentiloxifenol (incluindo isômeros), hexiloxifenol (incluindo isômeros), heptiloxifenol (incluindo isômeros), octiloxifenol (incluindo isômeros), noniloxifenol (incluindo isômeros), deciloxifenol (incluindo isômeros), dodeciloxifenol (incluindo isômeros), octadeciloxifenol (incluindo isômeros), ciclopentiloxifenol (incluindo isômeros), ciclo-hexiloxifenol (incluindo isômeros), ciclo-heptiloxifenol (incluindo isômeros), ciclooctiloxifenol (incluindo isômeros), (metilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), (etilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), (metilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (etilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (propilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (butilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (pentilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (hexilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (dimetilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (dietilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (dibutilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), feniloxifenol, (metilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (etilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (propilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (butilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (pentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (hexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (heptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (octilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (nonilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (decilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bifeniloxifenol (incluindo isômeros), (dimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (dietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (dipropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (dibutilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (dipentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (dihexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (diheptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), terfeniloxifenol (incluindo isômeros), (trimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (trietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros),

(tripropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (tributilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetiloxi) fenol, (feniletiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilpropiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilbutiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilpentiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilhexiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilheptiloxi) fenol (incluindo isômeros), (feniloctiloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilnoniloxi) fenol (incluindo isômeros), dimetoxifenol (incluindo isômeros), dietoxifenol (incluindo isômeros), dipropiloxifenol (incluindo isômeros), dibutiloxifenol (incluindo isômeros), dipentiloxifenol (incluindo isômeros), dihexiloxifenol (incluindo isômeros), diheptiloxifenol (incluindo isômeros), dioctiloxifenol (incluindo isômeros), dinoniloxifenol (incluindo isômeros), dideciloxifenol (incluindo isômeros), didodeciloxifenol (incluindo isômeros), dioctadeciloxifenol (incluindo isômeros), diciclopentiloxifenol (incluindo isômeros), diciclo-hexiloxifenol (incluindo isômeros), diciclo-heptiloxifenol (incluindo isômeros), dicicloctiloxifenol (incluindo isômeros), di(metilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(etilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(metilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(etilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(propilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(butilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(pentilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(hexilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dimetilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), feniloxifenol, di(metilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(etilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(propilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(butilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(pentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(hexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(heptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(octilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(nonilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(decilfeniloxi) fenol (incluindo

isômeros), dibifeniloxifenol (incluindo isômeros), bis(dimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dipropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dibutilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dipentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(dihexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), bis(diheptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), diterfeniloxifenol (incluindo isômeros), di(trimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(trietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(tripropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), di(tributilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetiloxi) fenol, di(feniletiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilpropiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilbutiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilpentiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilhexiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilheptiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(feniloctiloxi) fenol (incluindo isômeros), di(fenilnoniloxi) fenol (incluindo isômeros), trimetoxifenol (incluindo isômeros), trietoxifenol (incluindo isômeros), tripropiloxifenol (incluindo isômeros), tributiloxifenol (incluindo isômeros), tripentiloxifenol (incluindo isômeros), trihexiloxifenol (incluindo isômeros), triheptiloxifenol (incluindo isômeros), trioctiloxifenol (incluindo isômeros), trinoniloxifenol (incluindo isômeros), trideciloxifenol (incluindo isômeros), tridodeciloxifenol (incluindo isômeros), trioctadeciloxifenol (incluindo isômeros), triciclopentiloxifenol (incluindo isômeros), triciclo-hexiloxifenol (incluindo isômeros), triciclo-heptiloxifenol (incluindo isômeros), triciclooctiloxifenol (incluindo isômeros), tri(metilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(etilciclopentiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(metilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(etilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(propilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(butilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(pentilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(hexilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dimetilciclo-hexiloxi)

fenol (incluindo isômeros), tri(dietilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dibutilciclo-hexiloxi) fenol (incluindo isômeros), feniloxifenol, tri(metilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(etilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(propilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(butilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(pentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(hexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(heptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(octilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(nonilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(decilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tribifeniloxifenol (incluindo isômeros), tri(dimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dipropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dibutilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dipentilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(dihexilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(diheptilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), triterfeniloxifenol (incluindo isômeros), tri(trimetilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(trietilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(tripropilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(tributilfeniloxi) fenol (incluindo isômeros), (fenilmetiloxi) fenol, tri(feniletiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilpropiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilbutiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilpentiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilhexiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilheptiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(feniloctiloxi) fenol (incluindo isômeros), tri(fenilnoniloxi) fenol (incluindo isômeros), naftol (incluindo isômeros), fenoxifenol (incluindo isômeros), e difenoxifenol (incluindo isômeros). Particularmente exemplos preferíveis incluem compostos mono-hidróxi aromático em que o R^{26} e o R^{27} são átomos de hidrogênio, enquanto outros substituintes são grupos alquila saturados lineares e/ou cíclicos, naftol (incluindo isômeros), fenoxifenol (incluindo isômeros) e difenoxifenol (incluindo isômeros).

Como foi previamente descrito, um composto hidróxi aromático

tendo uma estrutura específica é usado preferivelmente do ponto de vista de reatividade na reação entre um composto tendo grupos ureído e/ou um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático (isto é, uma reação de esterificação ou reação de transesterificação).

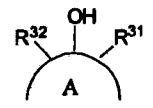
Inversamente, os inventores da presente invenção verificaram que, no caso um grupo ligado ao átomo na posição α de um substituinte de pelo menos uma posição orto do composto hidróxi aromático é um substituinte volumoso, a taxa de formação de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído diminui consideravelmente. Mais especificamente, isto se refere a um composto hidróxi aromático em que um substituinte em que o átomo na posição α é um átomo de carbono terciário ou quaternário ou átomo de nitrogênio terciário é ligado a pelo menos uma posição orto relativa a um grupo hidróxi do composto hidróxi aromático. A demonstração de tal efeito por este composto hidróxi aromático também não é encontrada na técnica anterior. A seguir, um composto hidróxi aromático parem que a taxa de formação de O-Ar éster de ácido carbâmico N-substituído é baixa é frequentemente referido como um composto hidróxi aromático de atividade baixa.

Ademais, como um resultado de focalizar-se no fato de que a taxa de formação de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído difere dependendo do tipo de composto hidróxi aromático como descrito acima, os inventores da presente invenção imaginaram e completaram um método de produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído que usa uma composição de hidróxi aromático contendo uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi aromático.

O composto hidróxi aromático explicado abaixo é um composto hidróxi aromático de baixa atividade que é usado em um método de produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído que usa uma composição de hidróxi aromático contendo uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi

aromático, e que usa uma composição de hidróxi aromático que contém um composto hidróxi aromático ativo e um composto hidróxi de baixa atividade. Isto é, o método de produção é um método de produção de O-éster de ácido carbâmico N-substituído que usa uma composição de hidróxi aromático contendo um composto hidróxi aromático tendo uma elevada taxa de formação de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído como indicado acima (o composto hidróxi aromático ativo mencionado acima) e um composto hidróxi aromático tendo uma taxa de formação baixa de O-éster de ácido carbâmico N-substituído (frequentemente referido como um composto hidróxi aromático de baixa atividade).

O composto hidróxi aromático de baixa atividade descrito acima é representado pela seguinte fórmula (39):



(39)

(em que

anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo aromático substituído por b número de grupos hidróxi em locais arbitrários que mantém propriedades aromáticas, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e pode ser substituído por outros substituintes, e um número inteiro de 1 a 6 grupos OH representado por fórmula (39) são substituídos em um anel aromático contida no anel A (isto é, a fórmula (39) constitui uma porção do anel A, e um número inteiro de 1 a 6 estruturas em que o grupo R^{31} mencionado acima, grupo OH e grupo R^{32} são adjacentes estão respectivamente presentes no anel A).

R^{31} e R^{32} são grupos que substituem o anel aromático em que o grupo hidróxi é ligado, e que são ligados a um átomo de carbono adjacente ao átomo de carbono em que o grupo hidróxi é ligado. Um número inteiro de 1 a 6

grupos hidróxi são ligados um anel A, e deste modo, um número inteiro máximo de 1 a 6 de R^{31} e R^{32} são respectivamente ligados um anel A. Um composto hidróxi aromático representado por fórmula (39) é um composto hidróxi aromático que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50.

Exemplos de substituintes que substituem um grupo aromático do composto hidróxi aromático representado por fórmula (39) acima (grupos R^{31} e R^{32} serão subsequentemente explicados em detalhe) podem incluir grupos selecionados dentre um átomo de hidrogênio, um átomo de halogênio, um grupo alifático e um grupo aromático que são compostos de um grupo hidrocarboneto acíclico ou um grupo hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto monocíclico, um grupo hidrocarboneto policíclico condensado, um grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, um grupo espiro-hidrocarboneto, um grupo hidrocarboneto de montagem de anel, um grupo hidrocarboneto cíclico tendo uma cadeia lateral, um grupo heterocíclico, um grupo espiro heterocíclico, um grupo de anel hetero-reticulado ou um grupo heterocíclico), um grupo ligado a partir de um ou mais tipos de grupos selecionados a partir dos grupos hidrocarboneto acíclico e grupos hidrocarboneto cíclico mencionados acima, e grupos em que os grupos mencionados acima são ligados através de uma ligação covalente com um átomo de não metal específico (carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício). Além disso, uma ligação covalente com um átomo de não metal específico (carbono, oxigênio, nitrogênio, enxofre ou silício) como descrito acima está em um estado em que os grupos mencionados acima são ligados por uma ligação covalente com, por exemplo, grupos representados por uma fórmula mencionada acima (8) a (11) e (13) a (16).

Dentre estes substituintes, exemplos de substituintes que podem ser preferivelmente usados na presente forma de realização em consideração de

menos suscetibilidade para a ocorrência de reações laterais incluem grupos selecionados dentre o grupo consistindo de grupo hidrocarboneto acíclico e grupos hidrocarboneto cíclico (tais como um grupo hidrocarboneto monocíclico, um grupo hidrocarboneto policíclico condensado, um grupo hidrocarboneto cíclico reticulado, um grupo espiro-hidrocarboneto, um grupo hidrocarboneto de montagem de anel ou um grupo hidrocarboneto cíclico tendo a cadeia lateral), e grupos ligados a pelo menos um tipo de grupo selecionado a partir deste grupo (grupos mutuamente substituídos).

Além disso, no caso de transferir uma composição contendo um composto tendo grupos ureído em uma temperatura elevada ou no caso de reagindo um composto tendo grupos ureído e/ou um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático para obter um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em uma temperatura elevada, anel A do composto hidróxi aromático é preferivelmente um composto hidróxi aromático composto de um grupo tendo pelo menos um substituinte inativo (incluindo átomos de hidrogênio) em adição ao grupo aromático e grupos hidróxi ligado ao grupo aromático (aqui um substituinte inativo refere-se a um grupo em que o substituinte inativo não contém hidrogênio ativo como previamente descrito, embora possa ter um grupo hidroxila aromático).

Para prover uma explicação mais detalhada do substituinte, o composto hidróxi aromático representado por fórmula (39) é um composto hidróxi aromático tendo pelo menos um substituinte selecionado a partir dos grupos de substituintes explicados no seguinte (i) a (v) em adição ao grupo aromático e grupo hidróxi ligado ao grupo aromático (grupos R^{31} e R^{32} serão subsequentemente explicados em detalhes):

(i) um átomo de hidrogênio,

(ii) um grupo composto de átomos de carbono e átomos de hidrogênio (que pode também formar uma estrutura de anel por ligação com

anel A),

(iii) um grupo composto de átomos de carbono, átomos de hidrogênio e átomos de oxigênio (representando, por exemplo, um grupo éter composto de grupos alifáticos, grupo éter composto de grupos aromáticos ou grupo éter composto de grupos alifáticos e grupos aromáticos, mas excluindo grupos contendo hidrogênio ativo tais como um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo metina terminal e um grupo OH alcóolico, um grupo carboxila, um grupo NH_2, um grupo NH, um grupo NOH, um grupo SH, um grupo SO_3H ou um grupo SOH),

(iv) um átomo de halogênio, e

(v) um grupo composto de átomos selecionado dentre átomos de carbono, átomos de hidrogênio, átomos de oxigênio, átomos de nitrogênio, átomos de enxofre e átomos de halogênio (mas excluindo grupos contendo hidrogênio ativo tais como um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo metina terminal e um grupo OH alcóolico, um grupo carboxila, um grupo NH_2, um grupo NH, um grupo NOH, um grupo SH, um grupo SO_3H ou um grupo SOH).

R^{31} e R^{32} respectivamente e independentemente representam quaisquer dos grupos definidos como o seguinte (i) a (viii), pelo menos qualquer um é um grupo definido como o seguinte (vi) a (viii), e R^{31} e R^{32} podem ainda formar uma estrutura de anel condensado por ligação com anel A. No relacionamento entre anel A e o grupo hidroxila na fórmula mencionada acima (39), por exemplo, embora há frequentemente casos em que o número de R^{31} e R^{32} grupos ligados a um carbono adjacente a um grupo OH não coincide com o número dos grupos OH (como explicado na fórmula mencionada acima (32)), tais casos são permitidos desde que quer R^{31} ou R^{32} é um grupo definido como o seguinte (vi) a (viii):

(i) um átomo de hidrogênio,

(ii) um grupo composto de átomos de carbono e átomos de hidrogênio (que pode também formar uma estrutura de anel por ligação com anel A), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono, e o átomo de carbono é um átomo de carbono primário ou secundário (isto é, representando um átomo de carbono de um grupo metila ou um átomo de carbono que forma uma ligação $-CH_2-$), desde que no caso o R^{31} e/ou R^{31} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A e o anel condensado tem seis membros ou menos, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário, e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla ou ligação tripla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A) também, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário,

(iii) um grupo composto de átomos de carbono, átomos de hidrogênio e átomos de oxigênio (representando, por exemplo, um grupo éter composto de grupos alifáticos, um grupo éter composto de grupos aromáticos ou um grupo éter composto de grupos alifáticos e grupos aromáticos, mas não tendo um grupo OH alcóolico, um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo carboxila ou um grupo metina na terminação do mesmo), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono ou átomo de oxigênio, e no caso de um átomo de carbono, o átomo de carbono é um átomo de carbono primário ou secundário (isto é, um átomo de carbono de um grupo metila ou um átomo de carbono que forma uma ligação $-CH_2-$), desde que no caso em que R^{31} ou R^{32} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A e o anel condensado tem seis membros ou menos, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário, e no caso o átomo de carbono na

posição α forma uma ligação dupla ou ligação tripla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A) também, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário,

(iv) um átomo de halogênio,

(v) um grupo composto de átomos selecionado dentre átomos de carbono, átomos de hidrogênio, átomos de oxigênio, átomos de nitrogênio, átomos de enxofre e átomos de halogênio (mas excluindo grupos contendo hidrogênio ativo tais como um grupo OH alcóolico, um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo carboxila, um grupo metina terminal, um grupo NH_2, um grupo NH, um grupo NOH, um grupo SH, um grupo SO_3H ou um grupo SOH), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono, átomo de oxigênio ou átomo de enxofre, no caso de um átomo de carbono, o átomo de carbono é um átomo de carbono primário ou secundário (isto é, um átomo de carbono de um grupo metila ou um átomo de carbono que forma uma ligação $-CH_2-$), e no caso de um átomo de enxofre, o átomo de enxofre é um átomo de enxofre divalente (isto é, um átomo de enxofre que forma uma ligação -S-), desde que no caso o R^{31} ou R^{32} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A e o anel condensado tem seis membros ou menos, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário, e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla ou ligação tripla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A) também, o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono terciário ou quaternário,

(vi) um grupo composto de átomos de carbono e átomos de hidrogênio (que pode também formar uma estrutura de anel por ligação com anel A), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é

ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono, e o átomo de carbono é um átomo de carbono terciário ou quaternário (isto é, um átomo de carbono que forma uma ligação -CH- ou átomo de carbono não ligado por hidrogênio), desde que no caso o R^{31} e/ou R^{31} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A, o anel condensado pode ter sete membros ou mais, e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A), o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono quaternário, mas excluindo o carbono na posição α formando uma ligação tripla com o átomo na posição β,

(vii) um grupo composto de átomos de carbono, átomos de hidrogênio e átomos de oxigênio (representando, por exemplo, um grupo éter composto de grupos alifáticos, um grupo éter composto de grupos aromáticos ou um grupo éter composto de grupos alifáticos e grupos aromáticos, mas não tendo um grupo OH alcóolico, um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo carboxila ou um grupo metina na terminação do mesmo), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono, e o átomo de carbono é um átomo de carbono terciário ou quaternário (isto é, um átomo de carbono que forma uma ligação -CH- ou átomo de carbono não ligado por hidrogênio), desde que no caso o R^{31} e/ou R^{32} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A, o anel condensado pode ter sete membros ou mais, e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A), o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono quaternário, mas excluindo o carbono na posição α formando uma ligação tripla com o átomo na posição β, e

(viii) um grupo composto de átomos selecionados dentre átomos

de carbono, átomos de hidrogênio, átomos de oxigênio, átomos de nitrogênio, átomos de enxofre e átomos de halogênio (mas excluindo grupos contendo hidrogênio ativo tais como um grupo OH alcóolico, um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo carboxila, um grupo metina terminal, um grupo NH_2, um grupo NH, um grupo NOH, um grupo SH, um grupo SO_3H ou um grupo SOH), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono ou átomo de nitrogênio, no caso de um átomo de carbono, o átomo de carbono é um átomo de carbono terciário ou quaternário (isto é, um átomo de carbono que forma uma ligação -CH- ou átomo de carbono não ligado por hidrogênio), desde que no caso o R^{31} e/ou R^{32} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A, o anel condensado pode ter sete membros ou mais, e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{31} e R^{32} que é ligado ao anel aromático de anel A), o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono quaternário, mas excluindo o carbono na posição α formando uma ligação tripla com o átomo na posição β, enquanto no caso de um átomo de nitrogênio, o átomo de nitrogênio pode ser um átomo de nitrogênio terciário que liga com o átomo na posição β com uma ligação simples.

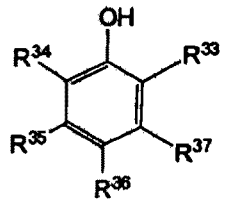
Além disso, anel A é preferivelmente uma estrutura que contém pelo menos uma estrutura selecionada dentre o grupo consistindo de um anel benzeno, um anel naftaleno e um anel antraceno. Em consideração do uso industrial, o composto hidróxi aromático inativo representado por uma fórmula mencionada acima (39) é preferivelmente um composto mono-hidróxi aromático em que um ou dois grupos hidroxila aromática são ligados um anel A (isto é, b = 1 ou 2), e mais preferivelmente um composto mono-hidróxi aromático em que um grupo hidroxila aromático é ligado um anel A, uma vez que eles tipicamente têm baixa viscosidade.

Embora uma explicação de um método para usar um composto hidróxi aromático inativo da presente forma de realização será provido mais tarde, em um aspecto da presente forma de realização, o composto hidróxi aromático e isocianato são separados por destilação, e o composto hidróxi aromático separado pode ser reciclado na forma de uma composição de hidróxi aromático que é reagido com o composto tendo grupos ureído. Separação é realizada usando ponto de ebulição padrão como um indicador, e o método é selecionado de acordo com a definição previamente descrita.

Além disso, quando o composto hidróxi aromático ativo e composto hidróxi aromático inativo mencionados acima são usados como uma composição de hidróxi aromático embora seja fácil separar e purificar os dois componentes se o composto hidróxi aromático é selecionado de modo que um relacionamento existe em que o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático ativo é 10°C ou maior que o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático inativo, isso não é requerido. No caso de usar uma pluralidade de compostos hidróxi aromático ativos e uma pluralidade de compostos hidróxi aromático inativos, os compostos hidróxi aromático são selecionados tal que um relacionamento existe em que o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático ativo tendo o menor ponto de ebulição padrão é 10°C ou mais elevado que o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático inativo tendo o maior ponto de ebulição padrão. Em consideração de separação e purificação, o número de tipos de compostos hidróxi aromático ativos e pouco ativos usados é tão baixo quanto possível, e, por exemplo, apenas um tipo de cada é usado preferivelmente.

Ademais, em consideração do uso industrial, o composto hidróxi aromático inativo é preferivelmente um composto mono-hidróxi aromático facilmente adquirível. Um exemplo preferível de tal composto mono-hidróxi aromático é um composto mono-hidróxi aromático representado pela seguinte

fórmula (40):



(40)

(em que

R^{35}, R^{36} e R^{37} são grupos respectivamente e independentemente selecionados a partir dos grupos mencionados acima R^7 a R^{14} (excluindo grupos arila tendo um grupo hidróxi), grupos R^{33} e R^{34} são grupos respectivamente e independentemente selecionados a partir dos grupos mencionados acima R^{31} e R^{32}, e o composto hidróxi aromático representado por fórmula (40) é um composto mono-hidróxi aromático tendo um número inteiro de 6 a 50 átomos de carbono, desde que o número total de átomos de carbono de grupos R^{33}, R^{34}, R^{35}, R^{36} e R^{37} é um inteiro de 0 a 44, e R^{33} e R^{34} são respectivamente e independentemente qualquer grupo definido como o seguinte (i) a (ii):

(i) um grupo composto de átomos de carbono e átomos de hidrogênio (que pode também formar uma estrutura de anel por ligação com anel A), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{33} e R^{34} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono, e o átomo de carbono é um átomo de carbono terciário ou quaternário (isto é, um átomo de carbono que forma uma ligação -CH- ou átomo de carbono não ligado por hidrogênio), desde que no caso o R^{33} e/ou R^{34} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A, o anel condensado pode ter sete membros ou mais, e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{33} e R^{34} que é ligado ao anel aromático de anel A), o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono quaternário, mas excluindo o carbono na posição α formando uma ligação tripla com o átomo na posição β, e

(ii) um grupo composto de átomos de carbono, átomos de hidrogênio e átomos de oxigênio (representando, por exemplo, um grupo éter composto de grupos alifáticos, um grupo éter composto de grupos aromáticos ou um grupo éter composto de grupos alifáticos e grupos aromáticos, mas não tendo um grupo OH alcóolico, um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo carboxila ou um grupo metina na terminação do mesmo), em que o átomo na posição α (átomo que forma o R^{33} e R^{34} que é ligado ao anel aromático de anel A) é um átomo de carbono, e o átomo de carbono é um átomo de carbono terciário ou quaternário (isto é, um átomo de carbono que forma uma ligação -CH- ou átomo de carbono não ligado por hidrogênio), desde que no caso o R^{33} e/ou R^{34} formam uma estrutura saturada e/ou insaturada de anel condensado com anel A, o anel condensado pode ter sete membros ou mais, e no caso o átomo de carbono na posição α forma uma ligação dupla com um átomo na posição β (adjacente a um átomo que forma o R^{33} e R^{34} que é ligado ao anel aromático de anel A), o carbono na posição α pode ser um átomo de carbono quaternário, mas excluindo o carbono na posição α formando uma ligação tripla com o átomo na posição β.

Exemplos preferíveis de tais compostos mono-hidróxi aromático representados por fórmula (40) podem incluir 2-terc-propilfenol (incluindo isômeros), 2-terc-butilfenol (incluindo isômeros), 2-terc-pentilfenol (incluindo isômeros), 2-terc-hexilfenol (incluindo isômeros), 2-terc-heptilfenol (incluindo isômeros), 2-terc-octilfenol (incluindo isômeros), 2-terc-nonilfenol (incluindo isômeros), 2-terc-decilfenol (incluindo isômeros), 2-terc-dodecilfenol (incluindo isômeros), 2-terc-octadecilfenol (incluindo isômeros), 2-sec-propilfenol (incluindo isômeros), 2-sec-butilfenol (incluindo isômeros), 2-sec-pentilfenol (incluindo isômeros), 2-sec-hexilfenol (incluindo isômeros), 2-sec-heptilfenol (incluindo isômeros), 2-sec-octilfenol (incluindo isômeros), 2-sec-nonilfenol (incluindo isômeros), 2-sec-decilfenol (incluindo isômeros),

2-sec-dodecilfenol (incluindo isômeros), 2-sec-octadecilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-terc-propilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-terc-butilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-terc-pentilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-terc-hexilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-terc-heptilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-terc-octilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-terc-nonilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-terc-decilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-terc-dodecilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-terc-octadecilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-sec-propilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-sec-butilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-sec-pentilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-sec-hexilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-sec-heptilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-sec-octilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-sec-nonilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-sec-decilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-sec-dodecilfenol (incluindo isômeros), 2,4-di-sec-octadecilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-terc-propilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-terc-butilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-terc-pentilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-terc-hexilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-terc-heptilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-terc-octilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-terc-nonilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-terc-decilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-terc-dodecilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-terc-octadecilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-sec-propilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-sec-butilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-sec-pentilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-sec-hexilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-sec-heptilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-sec-octilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-sec-nonilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-sec-decilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-sec-dodecilfenol (incluindo isômeros), 2,6-di-sec-octadecilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-terc-propilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-terc-butilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-terc-pentilfenol (incluindo isômeros),

2,4,6-tri-terc-hexilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-terc-heptilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-terc-octilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-terc-nonilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-terc-decilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-terc-dodecilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-terc-octadecilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-sec-propilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-sec-butilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-sec-pentilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-sec-hexilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-sec-heptilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-sec-octilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-sec-nonilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-sec-decilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-sec-dodecilfenol (incluindo isômeros), 2,4,6-tri-sec-octadecilfenol (incluindo isômeros), (2-metoxi-2-metiletil) fenol, (2-etoxi-2-metiletil) fenol, (2-propoxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-butiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-pentiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-hexiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-heptiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-octiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-noniloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-deciloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-dodeciloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-octadeciloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-ciclopentiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-ciclo-hexiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-ciclo-heptiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-ciclooctiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(metilciclopentiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(etilciclopentiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(metilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(etilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(propilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(butilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),

(2-(pentilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(hexilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dimetilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dietilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dibutilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-fenoxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(metilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(etilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(propilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(butilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(pentilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(hexilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(heptilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(octilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(nonilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(decilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dimetilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dietilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dipropilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dibutilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dipentilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dihexilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(diheptilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(difenilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(trimetilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(trietilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(tripropilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(tributilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),

(2-(fenilmetoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(feniletoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilpropiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilbutiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilpentiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilhexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilheptiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(feniloctiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilnoniloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), (2-metoxi-2-metilpropil) fenol, (2-etoxi-2-metilpropil) fenol, (2-propoxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-butiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-pentiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-hexiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-heptiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-octiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-noniloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-deciloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-dodeciloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-octadeciloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-ciclopentiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-ciclo-hexiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-ciclo-heptiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-ciclooctiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(metilciclopentiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(etilciclopentiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(metilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(etilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(propilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(butilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),

(2-(pentilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(hexilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(dimetilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(dietilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(dibutilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-fenoxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(metilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(etilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(propilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(butilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(pentilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(hexilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(heptilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(octilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(nonilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(decilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(fenilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(dimetilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(dietilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(dipropilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(dibutilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(dipentilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(dihexilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(diheptilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(difenilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(trimetilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(trietilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
(2-(tripropilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),

(2-(tributilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilmetoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(feniletoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilpropiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilbutiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilpentiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilhexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilheptiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(feniloctiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(fenilnoniloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-metoxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-etoxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-propoxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-butiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-pentiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-hexiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-heptiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-octiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-noniloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-deciloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-dodeciloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-octadeciloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-ciclopentiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-ciclo-hexiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-ciclo-heptiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-ciclooctiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(metilciclopentiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(etilciclopentiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(metilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(etilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(propilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),

di(2-(butilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(pentilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(hexilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dimetilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dietilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dibutilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-fenoxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(metilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(etilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(propilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(butilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(pentilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(hexilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(heptilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(octilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(nonilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(decilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dimetilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dietilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dipropilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dibutilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dipentilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dihexilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(diheptilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(difenilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(trimetilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(trietilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),

di(2-(tripropilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(tributilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilmetoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(feniletoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilpropiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilbutiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilpentiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilhexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilheptiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(feniloctiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilnoniloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), di(2-metoxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-etoxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-propoxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-butiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-pentiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-hexiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-heptiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-octiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-noniloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-deciloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-dodeciloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-octadeciloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-ciclopentiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-ciclo-hexiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-ciclo-heptiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-ciclooctiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(metilciclopentiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(etilciclopentiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),

di(2-(metilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(etilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(propilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(butilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(pentilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(hexilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dimetilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dietilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dibutilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-fenoxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(metilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(etilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(propilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(butilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(pentilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(hexilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(heptilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(octilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(nonilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(decilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dimetilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dietilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dipropilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dibutilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dipentilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dihexilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(diheptilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),

di(2-(difenilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(trimetilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(trietilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(tripropilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(tributilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilmetoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(feniletoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilpropiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilbutiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilpentiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilhexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilheptiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(feniloctiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(fenilnoniloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-metoxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-etoxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-propoxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-butiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-pentiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-hexiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-heptiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-octiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-noniloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-deciloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-dodeciloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-octadeciloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-ciclopentiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-ciclo-hexiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-ciclo-heptiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-ciclooctiloxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(metilciclopentiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),

tri(2-(etilciclopentiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(metilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(etilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(propilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(butilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(pentilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(hexilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(trimetilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(trietilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(tributilciclo-hexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-fenoxi-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(metilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(etilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(propilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(butilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(pentilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(hexilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(heptilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(octilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(nonilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(decilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(fenilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(trimetilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(trietilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(tripropilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(tributilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(tripentilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(trihexilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),

tri(2-(triheptilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(trifenilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(trimetilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(trietilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(tripropilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(tributilfenoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(fenilmetoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(feniletoxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(fenilpropiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(fenilbutiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(fenilpentiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(fenilhexiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(fenilheptiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(feniloctiloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-(fenilnoniloxi)-2-metiletil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-metoxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-etoxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-propoxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-butiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-pentiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-hexiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-heptiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-octiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-noniloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-deciloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-dodeciloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-octadeciloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),
tri(2-ciclopentiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),

tri(2-ciclo-hexiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-ciclo-heptiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-ciclooctiloxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(metilciclopentiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(etilciclopentiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(metilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(etilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(propilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(butilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(pentilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(hexilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(trimetilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(trietilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(tributilciclo-hexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-fenoxi-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(metilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(etilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(propilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(butilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(pentilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(hexilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(heptilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(octilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(nonilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(decilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(fenilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(trimetilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(trietilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros),

tri(2-(tripropilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(tributilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(tripentilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(trihexilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(triheptilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(trifenilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(trimetilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(trietilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(tripropilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(tributilfenoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(fenilmetoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(feniletoxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(fenilpropiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(fenilbutiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(fenilpentiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(fenilhexiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(fenilheptiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(feniloctiloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(fenilnoniloxi)-2-metilpropil) fenol (incluindo isômeros), (dimetilamino) fenol, (dietilamino) fenol, (dipropilamino) fenol (incluindo isômeros), (dibutilamino) fenol (incluindo isômeros), (dipentilamino) fenol (incluindo isômeros), (dihexilamino) fenol (incluindo isômeros), (diheptilamino) fenol (incluindo isômeros), (dioctilamino) fenol (incluindo isômeros), (dinonilamino) fenol (incluindo isômeros), (didecilamino) fenol (incluindo isômeros), (didodecilamino) fenol (incluindo isômeros), (dioctadecilamino) fenol (incluindo isômeros), (2-fenil-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(metilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(etilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(propilfenil)-isopropil) fenol (incluindo

isômeros), (2-(butilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(pentilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(hexilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(heptilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(octilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(nonilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(decilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(bifenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dimetilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dietilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dipropilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dibutilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dipentilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dihexilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(diheptilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(terfenil)-isopropil) fenol, (2-(trimetilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(trietilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(tripropilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-(tributilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-fenil-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(metilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(etilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(propilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(butilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(pentilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(hexilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(heptilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(octilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(nonilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(decilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(bifenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dimetilfenil)-isopropil) fenol (incluindo

isômeros), di(2-(dietilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dipropilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dibutilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dipentilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dihexilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(diheptilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(terfenil)-isopropil) fenol, di(2-(trimetilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(trietilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(tripropilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(tributilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-fenil-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(metilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(etilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(propilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(butilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(pentilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(hexilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(heptilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(octilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(nonilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(decilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(bifenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dimetilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dietilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dipropilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dibutilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dipentilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dihexilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(diheptilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(terfenil)-isopropil) fenol, tri(2-(trimetilfenil)-isopropil) fenol (incluindo

isômeros), tri(2-(trietilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(tripropilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(tributilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), (2-fenil-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(metilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(etilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(propilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(butilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(pentilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(hexilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(heptilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(octilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(nonilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(decilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(bifenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dimetilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dietilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dipropilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dibutilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dipentilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(dihexilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(diheptilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(terfenil)-sec-butil) fenol, (2-(trimetilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(trietilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(tripropilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), (2-(tributilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-fenil-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(metilfenil)--sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(etilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(propilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(butilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(pentilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(hexilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(heptilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros),

di(2-(octilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(nonilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(decilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(bifenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dimetilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dietilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dipropilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dibutilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dipentilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(dihexilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(diheptilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(terfenil)--sec-butil) fenol, di(2-(trimetilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(trietilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(tripropilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), di(2-(tributilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-fenil-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(metilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(etilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(propilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(butilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(pentilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(hexilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(heptilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(octilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(nonilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(decilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(bifenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dimetilfenil)-isopropil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dietilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dipropilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dibutilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros),

tri(2-(dipentilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(dihexilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(diheptilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(terfenil)-sec-butil) fenol, tri(2-(trimetilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(trietilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), tri(2-(tripropilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros), e tri(2-(tributilfenil)-sec-butil) fenol (incluindo isômeros).

Os exemplos mais preferíveis dos mesmos podem incluir compostos mono-hidróxi aromático em que grupos R^{33}, R^{34}, R^{35}, R^{36} e R^{37} são grupos alquila saturados lineares e/ou cíclicos, e em que pelo menos um de R^{33} e R^{34} tem um átomo de carbono terciário ou quaternário para o átomo de carbono na posição α.

<Derivado de ácido carbônico>

O derivado de ácido carbônico na presente forma de realização refere-se a um composto representado pela seguinte fórmula (19). No caso de usar a composição para transferência e armazenamento do composto tendo os grupos ureído em uma etapa de produção de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído ou etapa de produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, isto é nas etapa (R), etapa (P) ou etapa (B) mencionadas acima, ou no caso de usar um componente reciclado a partir destas etapas de produção quando produzindo um composto tendo grupos ureído, o derivado de ácido carbônico é um componente que pode estar contido na composição para transferência e armazenamento do composto tendo os grupos ureído. Além disso, o derivado de ácido carbônico é um componente que também serve como uma matéria prima de um composto tendo grupos ureído.



(19)

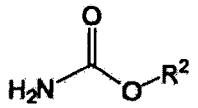
(em que

X e Y representam grupos orgânicos ou grupos amino ($-NH_2$)

tendo 1 a 50 átomos de carbono, desde que X e Y não são simultaneamente grupos amino, e o valor do número de átomos de carbono é um valor integral).

Exemplos de compostos representados por uma fórmula mencionada acima (19) que são usados na presente forma de realização podem incluir O-aril ésteres de ácido carbâmico não N-substituídos, O-R^2 ésteres de ácido carbâmico não N-substituído e ésteres de ácido carbônico. Embora as expressões "ácido carbâmico não N-substituídos", "O-aril ésteres de ácido carbâmico não N-substituídos" e "O-R^2 ésteres de ácido carbâmico não N-substituídos" são usados na explicação da presente forma de realização e como nomes de fórmula geral de compostos, aqui o termo "ácido carbâmico não N-substituído" é usado no sentido do grupo NH_2 do grupo carbomoila (NH_2-CO-) não sendo substituído por um substituinte. Isto é, o grupo NH_2 do grupo carbomoila (NH_2-CO-) de um ácido carbâmico não N-substituído é um grupo NH_2.

Um O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído representado pela seguinte fórmula (21) é preferivelmente usado para o O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído:



(21)

(em que

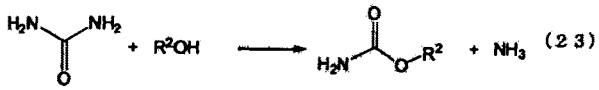
o grupo R^2 é o mesmo como o grupo R^2 de um álcool representado por fórmula (4) e representa um grupo composto de um grupo alifático em que é ligado um grupo alifático ou grupo aromático contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 14, e o grupo O-R^2 do O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído representado por fórmula (21) é um grupo R^2O de R^2OH de um álcool representado por fórmula (4)).

O O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído pode ser formado como um subproduto durante produção de O-aril éster de ácido

carbâmico N-substituído em um processo compreendendo a etapa (A) e/ou a etapa (R) que usa um álcool (isto é, um processo em que álcool é usado), ou pode ser um O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído produzido pelo método conhecido. O método conhecido é preferivelmente um método para obter O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído a partir de uréia e álcool como mostrado na seguinte fórmula de reação (23) reagindo ácido isociânico (HNCO) e álcool como mostrado na seguinte fórmula de reação (22), e um O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído representado por fórmula (21) acima pode ser obtido usando um álcool representado por fórmula (4) para o álcool usado nesta vez.



(22)



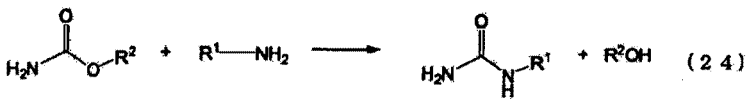
(23)

Grupos R^2 listados como exemplos na explicação de um álcool representado por fórmula (4) podem ser preferivelmente usados para o grupo R^2.

Exemplos de tais O-R^2 ésteres de ácido carbâmico não N-substituído representado por fórmula (21) podem incluir carbamato de metil, carbamato de etila carbamato, carbamato de propila (incluindo isômeros), carbamato de butila (incluindo isômeros), carbamato de pentila (incluindo isômeros), carbamato de hexila (incluindo isômeros), carbamato de heptila (incluindo isômeros), carbamato de octila (incluindo isômeros), carbamato de nonila (incluindo isômeros), carbamato de decila (incluindo isômeros), carbamato de undecila (incluindo isômeros), carbamato de dodecila (incluindo isômeros), carbamato de tridecila (incluindo isômeros), carbamato de tetradecila (incluindo isômeros), carbamato de pentadecila (incluindo isômeros), carbamato de hexadecila (incluindo isômeros), carbamato de heptadecila

(incluindo isômeros), carbamato de octadecila (incluindo isômeros), carbamato de nonadecila (incluindo isômeros), carbamato de benzila carbamato, carbamato de (metilbenzila) (incluindo isômeros), carbamato de (dimetilbenzila) (incluindo isômeros), carbamato de (feniletila) (incluindo isômeros), carbamato de (fenilpropila) (incluindo isômeros), carbamato de (fenilbutila) (incluindo isômeros), carbamato de (fenilpentila) (incluindo isômeros), carbamato de (fenilhexila) (incluindo isômeros), carbamato de (fenilheptila) (incluindo isômeros), carbamato de (feniloctila) (incluindo isômeros) e (fenilnonila) (incluindo isômeros). Os exemplos mais preferíveis incluem alquil ésteres de ácido carbâmico não N-substituído e aralquil ésteres de ácido carbâmico não N-substituído.

Compostos tendo grupos ureído podem ser obtidos a partir dos O-R^2 ésteres de ácido carbâmico não N-substituído mencionados acima reagindo com amina primária orgânica usando o método conhecido. A fórmula de reação é mostrada na seguinte fórmula (24). Em fórmula (24), embora uma estrutura de monoamina seja mostrada para a estrutura da amina primária orgânica, a estrutura pode também ser aquela de uma poliamina primária orgânica.

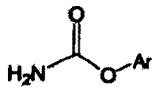


(24)

Na presente forma de realização, embora um composto tendo grupos ureído seja preferivelmente obtido realizando uma etapa (A) em que uma amina primária orgânica e uréia são reagidas, a reação de fórmula de reação (24) acima pode também ser realizada simultaneamente nela. Além disso, este método é preferível uma vez que possibilita que os produtos laterais de reação sejam usados efetivamente.

Um O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído representado pela seguinte fórmula (25) é preferivelmente usado para o O-aril

éster de ácido carbâmico não N-substituído:



(25)

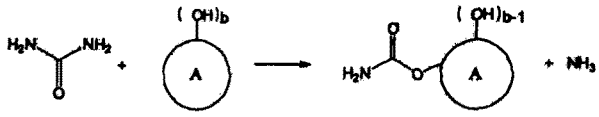
(em que

Ar representa um grupo derivado de um composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático, e o grupo Ar-O- representa um resíduo em que um átomo de hidrogênio de um grupo hidroxila ligado diretamente a um anel de hidrocarboneto aromático foi removido a partir do composto hidróxi aromático).

O composto representado por fórmula (25) pode ser um O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído qualquer formado como um subproduto durante produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por um processo compreendendo qualquer da etapa (A), etapa (P) ou etapa (B) usando uma composição de hidróxi aromático, ou produzido usando o método conhecido. O método conhecido é preferivelmente um método em O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído é obtido a partir de uréia e composto hidróxi aromático como mostrado na seguinte fórmula de reação (27) em uma reação entre ácido isociânico (HNCO) e composto hidróxi aromático como mostrado na seguinte fórmula de reação (26), e usando um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) para o composto hidróxi aromático usado nesta vez, um O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído representado por fórmula (25) acima pode ser obtido:



(26)



(27)

(em que

anel A e b são iguais como definidos para o composto hidróxi aromático representado por fórmula (2), e a ligação oxigênio-anel A ligada ao grupo carbomoila (NH_2-CO-) contida na estrutura do O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído representada em fórmulas (26) e (27) representa um resíduo em que um átomo de hidrogênio foi removido a partir de um grupo hidróxi ligado ao anel aromático do composto hidróxi aromático).

Na descrição acima, embora uma estrutura seja mostrada em que apenas um grupo hidróxi simples do composto hidróxi aromático reagiu, um O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído polivalente pode ser formado tendo uma estrutura diferente daquela indicada acima.

Uma vez que um composto hidróxi aromático é geralmente usado em excesso na presente forma de realização, a estrutura é tal que a razão entre grupos de ácido carbâmico no O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído e grupos derivados de um resíduo hidróxi aromático derivado de fórmula (2) é geralmente 1:1.

Um composto tendo grupos ureído pode ser obtido a partir do O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído mencionado acima reagindo com amina primária orgânica usando o método conhecido. A fórmula de reação é mostrada na seguinte fórmula (28):



(28)

(em que

Ar é o mesmo como o definido para o Ar explicado na fórmula mencionada acima (25)).

Na presente forma de realização, embora o composto tendo os grupos ureído é preferivelmente obtido realizando uma etapa (A) contendo reagindo amina primária orgânica e uréia, a reação mostrada em fórmula (28) acima pode também ser realizada simultaneamente. Em fórmula (28), embora

ambos, o O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído e a amina primária orgânica, sejam representados como sendo monovalentes (tendo um sítio de reação), estes podem também ser um O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído polivalente e poliamina primária orgânica, respectivamente.

Além disso, este método é preferível uma vez que possibilita que os produtos laterais de reação sejam usados efetivamente. Além disso, na etapa (A) a reação de fórmula (24) derivada do O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído acima descrito e a reação de fórmula (28) derivada de um O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído pode também ser realizada simultaneamente.

Uma estrutura em que um ou mais grupos hidróxi ligados a um aromático contido em um composto hidróxi aromático listado como um exemplo na explicação de um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) foram removidos pode ser preferivelmente usada para o grupo Ar. Isto é, um resíduo em que um átomo de hidrogênio de um grupo hidroxila diretamente ligado a um anel de hidrocarboneto aromático foi removido a partir de um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) pode ser preferivelmente usado para o grupo -O-Ar do O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído de uma fórmula mencionada acima (25). Além disso, entre compostos hidróxi aromático representados por fórmula (2), um composto mono-hidróxi aromático representado por fórmula (31) ou fórmula (32) é preferível, enquanto um composto mono-hidróxi aromático ativo representado por fórmula (38) é mais preferível. Naturalmente, um tipo ou dois ou mais tipos podem ser usados.

Exemplos de tais O-aril ésteres de ácido carbâmico não N-substituído representados por fórmula (21) podem incluir carbamato de fenila, carbamato de (metilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (etilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (propilfenila) (incluindo

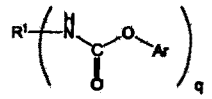
isômeros), carbamato de (butilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (pentilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (hexilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (heptilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (octilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (nonilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (decilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (bifenila) (incluindo isômeros), carbamato de (dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (dietilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (terfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (trietilfenila) (incluindo isômeros), carbamato de (tripropilfenila) (incluindo isômeros) e carbamato de (tributilfenila) (incluindo isômeros). Exemplos preferíveis destes podem incluir O-aril ésteres de ácido carbâmico não N-substituído em que o grupo arila do -O-aril éster é um grupo fenila substituído com um grupo alquila ou um grupo fenila.

Como foi descrito acima, um O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico não N-substituído representado por fórmula (21) ou fórmula (25) pode ser efetivamente usado como uma matéria prima de síntese de um composto tendo grupos ureído. Embora existam casos em que um monômero complexamente substituído ou polímero de composto uréia, biureto ou nurato e semelhantes podem também estar contidos nesta vez como um derivado de ácido carbônico em adição à uréia previamente descrita, álcool, amônia, éster de ácido carbâmico N-substituído e éster de ácido carbônico subsequentemente explicado e semelhantes, não há problemas com tal composto estando contido. Além disso, Embora existam casos em que o termo "O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico não N-substituído" é usado na explicação do presente relatório,

isso se refere a "um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído ou O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído".

<O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído>

O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído produzido com o método da presente forma de realização é um composto representado pela seguinte fórmula (43). Embora subsequentemente explicado em detalhes, a presente forma de realização refere-se a um método para esterificar um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático, ou um método para obter um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído esterificando um composto tendo grupos ureído e um álcool seguido por transesterificar o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (e o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído refere-se a um éster de ácido carbâmico N-substituído em que um átomo de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) é ligado a um anel aromático). Dando uma explicação mais detalhada, o grupo O-aril no grupo O-aril éster de ácido carbâmico do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é um resíduo em que um átomo de hidrogênio foi removido a partir de um grupo hidróxi simples (grupo OH) ligado a um átomo de carbono de anel aromático de um composto hidróxi aromático. Isto é, o primeiro método descrito acima é um método para esterificar um grupo ureído (-$NHCONH_2$) e um composto hidróxi aromático para obter um grupo O-aril de ácido carbâmico (-NHCOOAr), enquanto o último método descrito acima é um método para esterificar um grupo ureído (-$NHCONH_2$) e um álcool para obter um grupo O-R^2 de ácido carbâmico (-$NHCOOR^2$) seguido por transesterificar com um composto hidróxi aromático para obter um grupo O-aril de ácido carbâmico (-NHCOOAr):



(43)

(em que

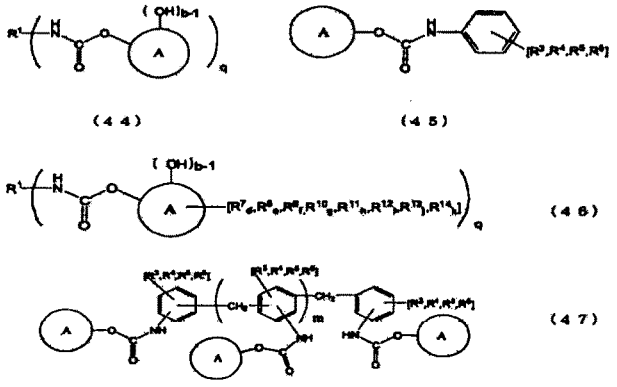
R^1 representa um grupo derivado de uma amina primária orgânica ou composto tendo grupos ureído como previamente definido,

Ar representa um grupo derivado de um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) que compõe uma composição de hidróxi aromático, e o grupo Ar-O- representa um resíduo em que um átomo de hidrogênio simples de um grupo hidroxila ligado diretamente a um anel de hidrocarboneto aromático foi removido a partir do composto hidróxi aromático, e

q representa um inteiro de 1 a a ou um inteiro de 1 a c, e a e c são como previamente definido).

A estrutura específica do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado por fórmula (43) acima é determinada pela amina primária orgânica e/ou composto tendo grupos ureído e composição de hidróxi aromático usados. Por exemplo, no caso de usar um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) e/ou uma amina primária orgânica representada por fórmula (3) e usando um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) para a composição de hidróxi aromático, um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (44) é obtido, no caso de usar uma amina primária orgânica representada por fórmula (5) e um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) para a composição de hidróxi aromático (e no caso b = 1), um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (45) é obtido, no caso de usar um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) e/ou uma amina primária orgânica representada

por fórmula (3) e usando um composto hidróxi aromático representado por fórmula (7) para a composição de hidróxi aromático, um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (46) é obtido, e no caso de usar uma amina primária orgânica representada por fórmula (5) e um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) para a composição de hidróxi aromático (e no caso b = 1) e produzindo por um método que inclui a etapa (C), um poli(O-aril éster de ácido carbâmico) N-substituído representado pela seguinte fórmula (47) é obtido (o poli(O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído mencionado acima) refere-se a um O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído tendo uma pluralidade de grupos de O-aril éster de ácido carbâmico em uma molécula deste). Desta maneira, uma faixa diversa de O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído pode ser obtida com o método de produção da presente forma de realização, e pode ser tipicamente representado por uma fórmula mencionada acima (43). (Embora o termo "arila", de acordo com as regras de nomenclatura definidas por IUPAC, refere-se a um anel aromático monovalente, e o termo "arila" é usado na presente forma de realização uma vez que um termo adequado que genericamente refere-se aos compostos na presente forma de realização não foi capaz de ser encontrado, o grupo referido pelo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído da presente forma de realização contém os O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído indicados acima. Alternativamente, um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído na presente forma de realização pode também ser referido como um O-Ar éster de ácido carbâmico N-substituído, ou em outras palavras, Ar tem o mesmo significado como previamente descrito.):



(em que

R^1 representa um grupo derivado de uma amina primária orgânica como previamente definido,

anel A representa um grupo derivado de um composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático como previamente definido, que é um resíduo em que um átomo de hidrogênio simples de um grupo hidroxila diretamente ligado a um anel de hidrocarboneto aromático foi removido a partir do composto hidróxi aromático,

R^3 a R^{14} representam grupos como previamente definido,

b, d, e, f, g, h, i, j, k, m e q são inteiros como acima definido, e

q representa um inteiro de 1 a a ou um inteiro de 1 a c, e a e c são como previamente definidos).

Embora um polímero tendo uma estrutura complexa possa ser obtido como um resultado de uma pluralidade de grupos hidróxi no grupo aromático separadamente reagindo com um composto tendo grupos ureído no caso de usar um composto hidróxi aromático polivalente, uma vez que um excesso de composto hidróxi aromático é usado na presente forma de realização, geralmente um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado por fórmula (43) acima é obtido.

Embora todos os exemplos possíveis de compostos específicos não podem ser listados uma vez que o método de produção da presente forma de

realização pode ser aplicada a uma faixa diversa de compostos tendo grupos ureído, aminas orgânicas primárias, álcoois e compostos hidróxi aromático como previamente descrito, exemplos de tais compostos específicos podem incluir N,N'-hexanodiil-di(fenil éster de ácido carbâmico), N,N'-hexanodiil-di((metilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-hexanodiil-di((etilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-hexanodiil-di((propilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-hexanodiil-di((butilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-hexanodiil-di((pentilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexilfenil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil(metilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil(etilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil(propilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil(butilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil(pentilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil(hexilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil(heptilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil(octilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), fenil éster de ácido 3-(fenoxicarbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico, (metilfenil) estér de ácido 3-(metilfenoxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), (etilfenil) éster de ácido 3-(etilfenoxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexilcarbâmico (incluindo isômeros), (propilfenil) éster de ácido 3-(propilfenoxicarbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), (butilfenil) éster de ácido 3-(butilfenoxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), (pentilfenil) éster de ácido

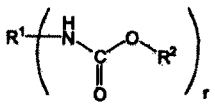
3-(pentilfenoxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), (hexilfenil) éster de ácido 3-(hexilfenoxicarbonilamino -metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), (heptilfenil) éster de ácido 3-(heptilfenoxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), (octilfenil) éster de ácido 3-(octilfenoxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), tolueno-di(fenil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di((metilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di((etilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di((propilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di((butilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di((pentilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di((hexilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di((heptilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di((octilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di(fenil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di((metilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di((etilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di((propilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di((butilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di((pentilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di((hexilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di((heptilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros) e N,N'-(metanodiil-difenil)-di((octilfenil) éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros). O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído preferíveis contêm O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído obtidos usando compostos

preferíveis previamente explicados para as aminas orgânicas primárias mencionadas acima, compostos hidróxi aromático e compostos tendo grupos ureído, cujos exemplos podem incluir O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído obtidos reagindo um composto mono-hidróxi aromático ativo com uma monouréia orgânica aromática N-substituída, poliuréia orgânica aromática N-substituída ou poliuréia orgânica alifática N-substituída, e O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído obtidos condensando um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido a partir de um composto mono-hidróxi aromático ativo e uma monouréia orgânica aromática N-substituída com um agente de condensamento. Além disso, O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído são também preferíveis em que todos os grupos ureído ou grupos amino primários contidos em um composto tendo grupos ureído ou amina primária orgânica são substituídos com grupos de O-aril éster de ácido carbâmico (isto é, a = q ou c = q).

<O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído>

Um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído produzido com o método de produção da presente forma de realização é um composto representado pela seguinte fórmula (49). Embora subsequentemente explicado em detalhes, a presente invenção como aqui referida indica um composto obtido quando produzindo um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por um processo que inclui a etapa (R) mencionada acima. Este é um composto em que um composto tendo grupos ureído é esterificado com um álcool representado por fórmula (4) para converter os grupos ureído (-$NHCONH_2$) para grupos de O-R^2 éster de ácido carbâmico (-$NHCOOR^2$). Isto é, isso é um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, que é obtido reagindo pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído com um álcool representado por fórmula (4) em uma fase líquida seguido por extração da amônia formada como um subproduto para uma fase gasosa, e o O-R^2 éster de ácido carbâmico

N-substituído refere-se a um éster de ácido carbâmico N-substituído em que átomos de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) são ligados ao grupo R^2 derivado do álcool. Em prover uma explicação mais detalhada, o grupo OR^2 no grupo O-R^2 éster de ácido carbâmico (-$NHCOOR^2$) do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é um resíduo em que um átomo de hidrogênio foi removido a partir de um grupo hidróxi simples (grupo OH) ligado a um átomo de carbono do álcool:



(49)

(em que

R^1 representa um grupo derivado de uma amina primária orgânica como previamente definido,

R^2 representa um grupo derivado de um álcool como previamente definido,

r é um inteiro de 1 a a ou de 1 a c, e a e c são como previamente definido).

Embora todos os exemplos possíveis de compostos específicos não possam ser listados uma vez que o método de produção da presente forma de realização pode ser aplicado a uma faixa diversa de compostos tendo grupos ureído, aminas orgânicas primárias e álcoois como previamente descritos, exemplos de tais compostos específicos podem incluir N,N'-hexanodiil-di(metil éster de ácido carbâmico), N,N'-hexanodiil-di(etil éster de ácido carbâmico), N,N'-hexanodiil-di(propil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-hexanodiil-di(ácido carbâmico butil éster) (incluindo isômeros), N,N'-hexanodiil-di(pentil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-hexanodiil-di(hexil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil metil éster), metileno-di(ciclo-hexil etil éster de ácido

carbâmico), metileno-di(ciclo-hexil propil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil butil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil pentil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil hexil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil heptil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metileno-di(ciclo-hexil octil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), metil éster de ácido 3-(metoxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico, etil éster de ácido 3-(etoxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), propil éster de ácido 3-(propiloxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), butil éster de ácido 3-(butiloxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), pentil éster de ácido 3-(pentiloxicarbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), hexil éster de ácido 3-(hexiloxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), heptil éster de ácido 3-(heptiloxicarbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), octil éster de ácido 3-(octiloxicarbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclo-hexil carbâmico (incluindo isômeros), tolueno-di(metil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di(etil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di(propil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di(butil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di(pentil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di(hexil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di(heptil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), tolueno-di(octil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di(metil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di(etil éster de ácido carbâmico)

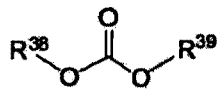
(incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di(propil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di(butil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di(pentil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di(hexil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros), N,N'-(metanodiil-difenil)-di(heptil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros) e N,N'-(metanodiil-difenil)-di(octil éster de ácido carbâmico) (incluindo isômeros). O-R^2 ésteres de ácido carbâmico N-substituído contêm O-R^2 ésteres de ácido carbâmico N-substituído obtidos usando compostos preferíveis previamente explicados para as aminas orgânicas primárias mencionadas acima, alcóois e compostos tendo grupos ureído, exemplos dos quais podem incluir O-R^2 ésteres de ácido carbâmico N-substituído obtidos reagindo um álcool com uma monouréia orgânica aromática N-substituída, poliuréia orgânica aromática N-substituída ou poliuréia orgânica alifática N-substituída, e O-R^2 ésteres de ácido carbâmico N-substituído obtidos condensando um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido a partir de um álcool e uma monouréia orgânica aromática N-substituída com um agente de condensamento. Além disso, O-R^2 ésteres de ácido carbâmico N-substituído são também preferível em que todos grupos ureído ou grupos amino primários contidos em um composto tendo grupos ureído ou amina primária orgânica são substituídos com ácido carbâmico-O-alquil éster grupos (isto é, a = r).

<Éster de ácido carbônico>

O éster de ácido carbônico é um componente que está preferivelmente contido em uma quantidade específica na composição para transferência e armazenamento da presente forma de realização.

Um éster de ácido carbônico refere-se a um composto em que um ou ambos dos dois átomos de hidrogênio de ácido carbônico ($CO(OH)_2$) são

substituídos com um grupo alifático ou grupo aromático. Um composto representado pela seguinte fórmula (20) é preferivelmente usado na presente forma de realização:



(20)

(em que

R^{38} e R^{39} são grupos que são respectivamente e independentemente selecionados a partir dos grupos R^2 e Ar mencionados acima).

O éster de ácido carbônico mencionado acima é formado por uma reação entre uréia e um álcool e/ou composto hidróxi aromático, uma reação entre um O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído e um álcool e/ou composto hidróxi aromático, ou uma reação de desproporcionamento do éster de ácido carbônico formado.

Exemplos dos grupos R^2 e Ar podem incluir os grupos R^2 e Ar explicados para o O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído.

Exemplos de éster de ácido carbônico representado pela fórmula (20) podem incluir carbonato de dimetila, carbonato de dietila, carbonato de dipropila (incluindo isômeros), carbonato de dibutila (incluindo isômeros), carbonato de dipentila (incluindo isômeros), carbonato de dihexila (incluindo isômeros), carbonato de diheptila (incluindo isômeros), carbonato de dioctila (incluindo isômeros), carbonato de dinonila (incluindo isômeros), carbonato de didecila (incluindo isômeros), carbonato de diundecila (incluindo isômeros), carbonato de didodecila (incluindo isômeros), carbonato de ditridecila (incluindo isômeros), carbonato de ditetradecila (incluindo isômeros), carbonato de dipentadecila (incluindo isômeros), carbonato de dihexadecila (incluindo isômeros), carbonato de diheptadecila (incluindo isômeros), carbonato de dioctadecila (incluindo isômeros), carbonato de dinonadecila

(incluindo isômeros), carbonato de difenila (incluindo isômeros), carbonato de di(metilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(etilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de di(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de di(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de di(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de di(fenilbutila) (incluindo isômeros), carbonato de di(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de di(fenilhexila) (incluindo isômeros), carbonato de di(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de di(feniloctila) (incluindo isômeros) di(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(etil) carbonate, carbonato de (metil)(propila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(butila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(pentila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(hexila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(heptila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(octila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(nonila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(decila) (incluindo

isômeros), carbonato de (metil)(undecila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(dodecila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(tridecila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(tetradecila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(pentadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(hexadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(heptadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(octadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(nonadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(fenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(metilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(etilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(fenilbutila) (incluindo isômeros), carbonato de

(metil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(fenilhexila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (metil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(propila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(butila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(pentila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(hexila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(heptila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(octila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(nonila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(decila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(undecila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(dodecila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(tridecila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(tetradecila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(pentadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(hexadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(heptadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(octadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(nonadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(fenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(metilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(etilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de

(etil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(fenilbutila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(fenilhexila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (etil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(butila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(pentila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(hexila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(heptila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(octila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(nonila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(decila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(undecila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(dodecila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(tridecila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(tetradecila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(pentadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(hexadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(heptadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(octadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(nonadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(fenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(metilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(etilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de

(propil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(fenilbutila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(fenilhexila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (propil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(pentila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(hexila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(heptila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(octila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(nonila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(decila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(undecila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(dodecila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(tridecila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(tetradecila)

(incluindo isômeros), carbonato de (butil)(pentadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(hexadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(heptadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(octadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(nonadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(fenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(metilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(etilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(fenilbutila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(fenilhexila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (butil)(feniloctila) (incluindo isômeros),

carbonato de (butil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(hexila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(heptila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(octila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(nonila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(decila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(undecila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(dodecila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(tridecila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(tetradecila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(pentadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(hexadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(heptadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(octadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(nonadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(fenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(metilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(etilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de

(pentil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(fenilbutila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(fenilhexila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(heptila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(octila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(nonila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(decila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(undecila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(dodecila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(tridecila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(tetradecila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(pentadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(hexadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(heptadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(octadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(nonadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(fenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(metilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(etilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(dietilfenila)

(incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(fenilbutila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(fenilhexila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(octila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(nonila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(decila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(undecila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(dodecila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(tridecila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(tetradecila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(pentadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(hexadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(heptadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(octadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(nonadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(fenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(metilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(etilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(pentilfenila) (incluindo isômeros),

carbonato de (heptil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(fenilbutila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(fenilhexila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (heptil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(nonila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(decila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(undecila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(dodecila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(tridecila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(tetradecila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(pentadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(hexadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(heptadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(octadecila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(nonadecila)

(incluindo isômeros), carbonato de (octil)(fenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(metilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(etilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(fenilbutila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(fenilhexila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (octil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (metilfenil)(etilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metilfenil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (metilfenil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de

(metilfenil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de
(metilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de

(etilfenil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(fenilmetil) carbonate, carbonato de (etilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (etilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(propilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(butilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de

(propilfenil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (propilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de

(butilfenil)(pentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (butilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(hexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de

(pentilfenil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (pentilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(heptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(octilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de

(hexilfenil)(nonilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(decilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(bifenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(dimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (hexilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(dietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de

(dimetilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (dimetilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(dipropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (dietilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de

(dietilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dietilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dietilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dietilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dietilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dietilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dietilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(dibutilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dipropilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dibutilfenil)(dipentilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dibutilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de
(dibutilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de

(dibutilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (dibutilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(dihexilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(diheptilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(fenilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(trimetilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(trietilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de

(dipentilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros), carbonato de (dipentilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(tretilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(tripropilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(tributilfenila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(fenilmetila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(feniletila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(fenilpropila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(fenibutila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(fenilpentila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(fenihexila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(fenilheptila) (incluindo isômeros), carbonato de (trimetilfenil)(feniloctila) (incluindo isômeros) e (trimetilfenil)(fenilnonila) (incluindo isômeros).

Uma quantidade de traço de éster de ácido carbônico é formada como um subproduto durante produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir da composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído da presente forma de realização e um composto hidróxi aromático e/ou durante produção de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído a partir de um composto tendo grupos ureído e um álcool como previamente descrito. Um aspecto preferível envolve produzir o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído seguido por reciclar os compostos usados em cada etapa quando produzindo isocianato termicamente decompondo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. O éster de ácido carbônico pode estar contido nesta vez quando a composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído é produzida recuperando o éster de ácido carbônico junto com o composto hidróxi aromático. O éster de ácido carbônico formado como um subproduto é um éster

de ácido carbônico derivado do composto hidróxi aromático e/ou álcool usado quando produzindo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, isto é um éster de ácido carbônico em que $R^{38}OH$ e $R^{39}OH$, em que grupos hidroxila foram adicionados a R^{38} e R^{39} de uma fórmula mencionada acima (20), correspondem ao composto hidróxi aromático e/ou álcool acima mencionados. Quando produzindo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído usando o composto para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído que contém o éster de ácido carbônico, ocorre também um mecanismo pelo qual O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído é regenerado por adição a um composto indesejável tendo grupos ureileno que é formado devido à condensação do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, assim tornando este aspecto preferível. Além disso, embora possam existir casos em que monômeros complexamente substituídos ou polímeros de compostos de uréia, biuretos ou nuratos e semelhantes estão contidos em adição ao composto uréia, éster de ácido carbâmico e éster de ácido carbônico, não há problemas com tais compostos estarem contidos.

Uma breve explicação foi dada de várias etapas na explicação de compostos usados na presente forma de realização como descrito acima. Em seguida, uma explicação detalhada é dada de um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir de um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático, bem como uma explicação detalhada de cada etapa contida no método para produzir isocianato a partir de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. O método de produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído da presente forma de realização é um método para produzir pelo menos um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado de um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático compreendendo uma etapa de realizar uma reação de esterificação ou etapas para efetuar uma reação de esterificação e

uma reação de transesterificação a partir do composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) e a composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) (aqui o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído refere-se a um éster de ácido carbâmico N-substituído em que um átomo de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) é ligado a um anel aromático, ou em outras palavras, um O-éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído e o composto hidróxi aromático). Mais especificamente, o método de produção é um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído compreendendo uma etapa de esterificar um composto tendo grupos ureído e pelo menos um tipo de composição de hidróxi aromático representado por fórmula (2), ou um método para produzir o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído compreendendo uma etapa de esterificar um composto tendo grupos ureído e um álcool representado por fórmula (4) para obter O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, e uma etapa de transesterificar o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e a composição de hidróxi aromático. Mais especificamente, o método de produção é um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir do composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático que compreende a etapa (B), ou um método para produzir o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir do composto tendo grupos ureído, a composição de hidróxi aromático e um álcool representado por fórmula (4) que compreende uma etapa (R) e uma etapa (P). Preferivelmente, o composto tendo grupos ureído é um composto tendo grupos ureído obtidos em etapa (A), e os métodos de produção mencionados acima respectivamente contém um método de produção que compreende a etapa (A) e a etapa (B) e um método de produção que compreende a etapa (A), uma etapa (R) e a etapa (P). O O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído mencionado acima se refere a um

O-éster de ácido carbâmico N-substituído derivado de um composto tendo grupos ureído e um grupo R^2 de um álcool representado por fórmula (4).

Primeiro, uma breve explicação é provida das etapas (A), (B), (C), (R), (P) e (F) previamente mencionadas junto com as seguintes (D), (E) e (G) que são também incluídas no método de produção da presente forma de realização.

<Etapa (D)>

A seguinte etapa (D) é realizada para recuperar uréia antes de etapa (B), etapa (R) ou etapa (P), ou simultânea à etapa (B), etapa (R) ou etapa (P):

etapa (D): uma etapa de remover uréia por destilação ou sublimação.

<Etapa (E)>

Etapa (E): uma etapa de reciclar a uréia recuperada em etapa (D) para etapa (A).

<Etapa (G)>

A seguinte etapa (G) é realizada para recuperar amônia formada como um subproduto em etapa (A) e/ou etapa (B) e/ou etapa (R), reagem com dióxido de carbono para regenerar uréia, e reciclar a uréia para etapa (A):

etapa (G): uma etapa de recuperar amônia formada como um subproduto, reagindo com dióxido de carbono para regenerar uréia, e reciclar uma uréia para etapa (A).

As etapas (D), (E) e (G) mencionadas acima serão subsequentemente descritas em detalhe.

O método de produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído da presente forma de realização possibilita a produção de diversos O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído selecionando os compostos usados, tais como amina primária orgânica, composição de hidróxi aromático e adicionalmente álcool e semelhantes, junto com selecionar e

combinar as etapas (A) a (G) mencionadas acima, e ainda possibilita a obtenção de isocianato a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído.

< Método de produção de composto tendo grupos ureído>

Como foi previamente descrito, o composto tendo os grupos ureído usados na presente forma de realização pode ser um composto tendo grupos ureído que é obtido pelo método conhecido. Preferivelmente, é um composto tendo grupos ureído que é obtido usando uma seguinte etapa (A):

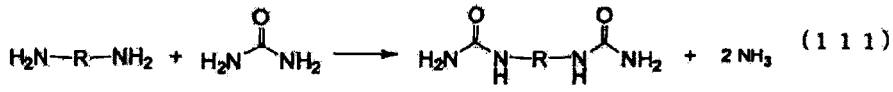
etapa (A): uma etapa de obter pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído derivado de uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (3) e uréia por ureidação a amina primária orgânica e a uréia em uma fase líquida e eliminando ou extraindo para uma fase gasosa a amônia formada como um subproduto na reação de ureidação.

O termo "eliminado" não se refere a um radical amônia, mas ao contrário à dissolução e/ou dispersão em uma fase líquida.

FIG. 1 mostra um desenho conceitual da etapa (A) na presente forma de realização. Além disso, a reação de ureidação mencionada acima indica uma reação entre um grupo amino de uma amina primária orgânica e um grupo ureído, isto é uma reação em que a amina primária orgânica é convertida em um composto tendo grupos ureído.

Como um resultado de estudos extensivos conduzidos pelos inventores da presente invenção, os inventores da presente invenção supuseram que o mecanismo de reação pelo qual um composto tendo grupos ureído é formado a partir de uma amina primária orgânica e uréia a ser como indicado abaixo, embora a sua totalidade não está ainda clara. Além disso, a fim de simplificar a seguinte explicação, uma amina primária orgânica tendo dois grupos amino é mostrada para a amina primária orgânica. Naturalmente, casos de usar uma amina primária orgânica diferentes daqueles mostrados aqui podem ser considerados da mesma maneira.

A reação para formar um composto tendo grupos ureído a partir de uma amina primária orgânica e uréia parece ser como mostrada na seguinte fórmula (111), e prossegue enquanto formando amônia como um subproduto embora não mostrada na fórmula:

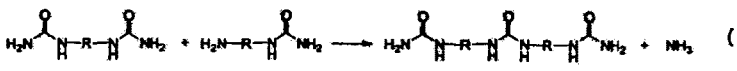


(111)

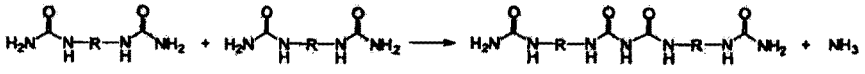
(em que

R representa um grupo orgânico substituído com dois substituintes).

Na reação para formar um composto tendo grupos ureído de fórmula (111) acima, uma reação, por exemplo, em que um composto tendo grupos ureileno é formado a partir de um composto tendo grupos ureído e amina primária orgânica como representado pela seguinte fórmula (113), ou por exemplo, uma reação em que um composto tendo grupos biureto é formado condensando um composto tendo grupos ureído como representado pela seguinte fórmula (114), pode ocorrer concomitantemente às reações laterais (as fórmulas de reação usada para explicar a presente forma de realização são para indicar os conceitos da reações (quaisquer compostos são reagentes ou produtos), e frequentemente não indicam números indicando razões estequiométricas):



(113)



(114)

(em que

R representa um grupo orgânico divalente).

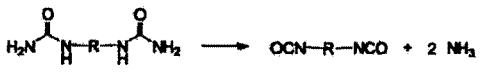
O seguinte provê uma explicação das quantidades de amina primária orgânica e uréia usadas como matérias primas em etapa (A). A

quantidade de uréia está dentro de uma faixa de uma razão estequiométrica de 1 a 100 vezes com base em grupos amino da amina primária orgânica. Embora previamente explicados para éster de ácido carbâmico não N-substituído, um composto tendo grupos ureído pode ser obtido reagindo com amina primária orgânica da mesma maneira como uréia também no caso de O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído e/ou O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Isto é, as quantidades de uréia indicadas previamente e indicadas a seguir são valores estequiométricos do total de uréia, O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído e O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído. No caso a quantidade usada de uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) é baixa, uma vez que compostos carbonila complexamente substituídos e semelhantes atribuíveis a fórmula (113) acima são formados facilmente, é preferível usar um excesso de uréia e éster de ácido carbâmico não N-substituído.

Além disso, uréia e éster de ácido carbâmico não N-substituído presentes em excesso no sistema de reação de etapa (A) são presumidos para ter o efeito de estabilizar o composto tendo grupos ureído formados (O-R^2 éster de ácido carbâmico não N-substituído e/ou O-aril éster de ácido carbâmico não N-substituído são frequentemente coletivamente referidos como éster de ácido carbâmico não N-substituído). De acordo aos estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, há casos em que compostos tendo uma ligação de biureto (tais como o composto no lado direito da seguinte fórmula (125)) ou compostos tendo uma terminação biureto (composto no lado direito da seguinte fórmula (126)) são formados durante o curso de produzindo o composto tendo grupos ureído dependendo das condições de reação. A fim de seletivamente formar um composto alvo tendo grupos ureído, é importante inibir a formação de tais compostos. Como um resultado de estudos extensivos conduzidos pelos inventores da presente invenção, verificou-se de modo surpreendente que há

um relacionamento íntimo entre a quantidade de uréia (e a quantidade de éster de ácido carbâmico não N-substituído) no sistema de reação e as quantidades de tais compostos formados, e que as quantidades de tais compostos são reduzidas quanto maior a quantidade presente de quantidade de uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído). Embora o mecanismo pelo qual uréia presente no sistema de reação demonstra este efeito não esteja claro, os inventores da presente invenção formularam as hipóteses indicadas abaixo com relação a este mecanismo.

Primeiro, é considerado o mecanismo pelo qual compostos tendo uma ligação de biureto e compostos tendo uma terminação biureto são formados. O composto tendo grupos ureído forma um composto tendo um isocianato terminal (grupo -NCO) e amônia devido à decomposição térmica dos grupos ureído dependendo das condições de reação (de acordo com a seguinte fórmula (124), por exemplo):

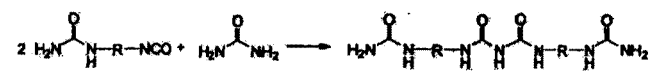


(124)

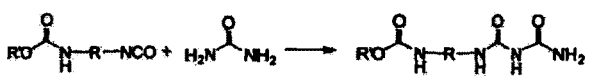
(em que

R representa um grupo orgânico divalente).

Presume-se que ocorram casos em que o composto tendo um isocianato terminal reage com uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) (como, por exemplo, nas seguintes fórmulas (125) e (126) explicadas usando uréia) para formar um composto tendo uma ligação de biureto ou composto tendo uma terminação biureto:



(125)



(126)

(em que

R representa um grupo orgânico divalente).

A uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) é

presumida para estabilizar os grupos ureído coordenando com os grupos ureído ligando por hidrogênio no líquido de reação, e tem o efeito de inibir a primeira reação em particular (isto é a reação representado por fórmula (124) acima) entre esta série de reações.

Desta maneira, o uso de uma quantidade de excesso de uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) é importante para seletivamente formar o composto tendo grupos ureído. No entanto, o uso de uma quantidade de uréia exageradamente excessiva (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) aumenta o do reator tornando aplicação industrial difícil, ou como será descrito mais tarde, pode dificultar separação e recuperação da uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído). Deste modo, a quantidade de uréia usada em termos da razão estequiométrica com base em grupos amino da amina primária orgânica está preferivelmente dentro de uma faixa de 1 a 100 vezes, mais preferivelmente dentro de uma faixa de 1,1 a 10 vezes e mais preferivelmente dentro de uma faixa de 1,5 a 5 vezes.

Além disso, é também necessário prestar atenção ao procedimento quando realizando a reação em consideração do papel da uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) como descrito acima. Isto é, um método é preferivelmente realizado em que, por exemplo, a quantidade de uréia inteira (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) usada é dissolvida antes em um solvente de reação (os detalhes dos quais serão subsequentemente descritos) seguido por adição da amina primária orgânica a esta solução misturada assim como para continuamente manter o número de moléculas de uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) no sistema de reação em um estado de excesso (e em um estado de grande excesso se possível) com base no número de grupos amino da amina primária orgânica.

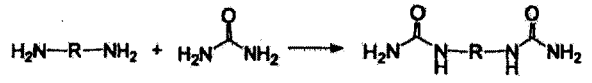
Em seguida, uma explicação é dada da concentração de amônia no sistema. Além disso, a faixa preferível da concentração de amônia descrita aqui

se refere à concentração de amônia no líquido de reação após o composto tendo grupos ureído tem formado para certo grau (tais como em um rendimento de não menos que 5% com base na amina orgânica), e não se refere àquela do início da reação.

A reação em que O-(R^2 e/ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído é formado (tais como a reação da seguinte fórmula (118)) é uma reação de equilíbrio, e o equilíbrio é consideravelmente inclinado ao lado de reagentes. No entanto, como um resultado de estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, a reação em que o composto tendo grupos ureído é formado (reação de uma fórmula mencionada acima (117)) foi determinada para ser uma reação em que o equilíbrio do mesmo é consideravelmente inclinado aos produtos laterais ou ser uma reação irreversível, e ser virtualmente independente da concentração de amônia no sistema. Tal descoberta foi até agora desconhecida e é surpreendente. Deste modo, foi verificado que o composto tendo grupos ureído pode ser formado seletivamente mantendo a concentração de amônia no líquido de reação de etapa (A) em certo nível ou maior e inibindo a formação de éster de ácido carbâmico N-substituído por uma reação entre o composto tendo grupos ureído formados e um composto hidróxi aromático (reação de uma fórmula mencionada acima (118)), e foi ainda verificado que o composto tendo grupos ureído pode ser obtido com boa seletividade inibindo reações laterais mantendo a concentração de amônia em certo nível ou maior. Em métodos previamente descritos para produzir compostos tendo grupos ureído, produtos de reação laterais facilmente formados quando obtendo um composto tendo grupos ureído de acordo com a reação mencionada acima, e estiveram contidos dentro de uma faixa em que O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído formado de acordo com a seguinte fórmula (118) é simultaneamente formado em grandes quantidades, deste modo resultando no problema sério da ocorrência

concomitante de reações laterais atribuíveis ao O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído. A fim de resolver este problema, a quantidade da uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) usada e/ou a concentração de amônia é importante. A concentração de amônia preferível para demonstrar tal efeito é maior que 10 ppm, mais preferivelmente maior que 100 ppm, ainda mais preferivelmente maior que 300 ppm, e mais preferivelmente maior que 1000 ppm.

Além disso, embora o termo "O-(R^2 e/ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído" é usado na explicação do presente relatório, ele refere-se a "O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e/ou O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído":



(117)



(118)

(em que

R representa um grupo orgânico substituído com dois substituintes, e

R'OH representa um composto hidróxi monovalente (álcool ou composto hidróxi aromático)).

Etapa (A) pode ser realizada em uma temperatura de reação dentro de uma faixa de 30 a 250°C. Embora uma temperatura elevada seja preferível para aumentar a taxa de reação, por outro lado, uma vez que reações indesejáveis ocorrem em elevadas temperaturas (tais como decomposição do derivado de ácido carbônico) resultando na formação de compostos uréia complexamente substituídos e compostos carbonila, a temperatura de reação está preferivelmente dentro de uma faixa de 50 a 200°C e mais preferivelmente dentro de uma faixa de 70 a 180°C. O aparelho de resfriamento conhecido ou

aparelho de aquecimento pode ser instalado no reator para realizar etapa (A) para manter uma temperatura de reação constante.

Embora variando de acordo com os tipos de compostos usados, composição do sistema de reação, temperatura de reação, aparelho de reação e semelhantes, geralmente a reação é preferivelmente realizada em uma pressão de reação dentro de uma faixa de 0,01 kPa a 10 MPa (pressão absoluta), e em consideração de facilidade da aplicação industrial, é preferivelmente realizada em pressão de reação dentro de uma faixa de 0,1 kPa a 5 MPa (pressão absoluta).

Não existem limitações particulares no tempo de reação (tempo de residência no caso de um método contínuo) na etapa (A), e o tempo de reação é geralmente de 0,001 a 100 horas, preferivelmente de 0,01 a 80 horas e mais preferivelmente de 0,1 a 50 horas. Além disso, a reação pode ser terminada após confirmar que uma quantidade desejada do composto tendo grupos ureído foi formada por amostragem do líquido de reação e determinando a quantidade do composto tendo grupos ureído por cromatografia líquida, por exemplo. Embora etapa (A) é uma etapa de produzir um composto tendo grupos ureído, em etapa (A), se uma quantidade grande de grupos amino derivados de amina orgânica não reagida estão presentes, compostos tendo grupos ureileno e semelhantes são formados durante armazenamento quando usando na forma de uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído, ou em etapa (B) ou etapa (R) usando o líquido de reação após etapa (A), que frequentemente não apenas causa uma diminuição na quantidade de O-éster de ácido carbâmico N-substituído formado, mas também causa adesão e solidificação no reator. Deste modo, em etapa (A), é preferível reduzir a quantidade de grupos amino derivados da amina primária orgânica formando o composto tendo grupos ureído em um rendimento tão elevado quanto possível. Mais especificamente, a reação é preferivelmente continuada até a

razão do número de grupos amino derivado da amina primária orgânica para o número de grupos ureído compondo o composto tendo grupos ureído torna-se preferivelmente 0,25 ou menos, mais preferivelmente 0,1 ou menos, e ainda mais preferivelmente 0,05 ou menos.

Na presente forma de realização, um catalisador pode ser usado como necessário, e exemplos de catalisadores que podem ser usados podem incluir compostos de metal orgânico e compostos de metal inorgânico de estanho, chumbo, cobre ou titânio, e catalisadores básicos tais como alcoolato de metais alcalinos ou metais alcalinos terrosos na forma de metilatos, etilatos e butiratos (incluindo isômeros) de lítio, sódio, potássio, cálcio ou bário. Se um catalisador é adicionado, uma vez que existem muitos casos em que é necessário remover o catalisador, a reação é preferivelmente realizada sem adicionar um catalisador. No caso de usar um catalisador, o catalisador pode ser removido após a reação. Uma vez que existem casos em que um catalisador pode ter um efeito prejudicial em compostos nas etapas da presente forma de realização, o catalisador é preferivelmente separado ou removido durante o curso de obter isocianato termicamente decompondo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e purificando o isocianato. Se isocianato é armazenado com o catalisador presente, descoloração e outros fenômenos indesejáveis podem ocorrer. O método conhecido pode ser usado para remover o catalisador, e métodos tais como separação de membrana, separação destilativa ou cristalização pode ser usada. O catalisador é preferivelmente removido para as razões descritas acima sem estar limitado à etapa (A). Mais preferivelmente, o catalisador é removido em finalização de cada etapa em que é usado. Métodos conhecidos como previamente descrito podem ser preferivelmente usados para remover o catalisador.

A reação de etapa (A) é preferivelmente realizada em uma fase líquida na presença de um solvente do ponto de vista de abaixar a viscosidade

do líquido de reação e/ou tornar o sistema de reação homogêneo. Exemplos de solventes que podem ser preferivelmente usados como solventes de reação podem incluir alcanos tais como pentano (incluindo isômeros), hexano (incluindo isômeros), heptano (incluindo isômeros), octano (incluindo isômeros), nonano (incluindo isômeros) ou decano (incluindo isômeros); hidrocarbonetos aromáticos e hidrocarbonetos aromáticos substituídos de alquila tais como benzeno, tolueno, xileno (incluindo isômeros), etil benzeno, diisopropil benzeno (incluindo isômeros), dibutil benzeno (incluindo isômeros) ou naftaleno; compostos nitrila tais como acetonitrila ou benzonitrila; compostos aromáticos substituídos com um grupo halogênio ou nitro tais como clorobenzeno, diclorobenzeno (incluindo isômeros), bromobenzeno, dibromobenzeno (incluindo isômeros), cloronaftaleno, bromonaftaleno, nitrobenzeno ou nitronaftaleno; compostos de hidrocarboneto policíclico tais como difenila, difenila substituída, difenil metano, terfenila, antraceno ou dibenzil tolueno (incluindo isômeros); hidrocarbonetos alifáticos tais como ciclo-hexano, ciclopentano, ciclooctano ou etilciclo-hexano; cetonas tais como metil etil cetona ou acetofenona; ésteres tais como ftalato de dibutila, ftalato de dihexila, ftalato de dioctila ou ftalato de benzilbutila; éteres e tioéteres tais como tetrahidrofurano, 1,4-dioxano, 1,2-dimetoxietano, difenil éter ou sulfeto de difenila; compostos cetona tais como acetona ou metil etil cetona; compostos éster tais como acetato de etila ou benzoato de etila; sulfóxidos tais como dimetilsulfóxido ou difenilsulfóxido, e compostos hidróxi tais como água, alcóois ou compostos hidróxi aromático. No entanto, do ponto de vista de solubilidade do produto na forma do composto tendo grupos ureído, o solvente de reação é preferivelmente água ou uma composição de hidróxi (composição contendo álcool e/ou composto hidróxi aromático), e mais preferivelmente uma composição de hidróxi (a composição de hidróxi sendo uma composição de hidróxi composta de um tipo ou uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi

(álcool representado por fórmula (4) e/ou composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)), e uma composição de hidróxi preferivelmente usada como um solvente de reação em etapa (A) é em seguida referida como "composição de hidróxi a"). Além disso, estes solventes podem ser usados sozinhos ou como uma mistura de dois ou mais tipos dos mesmos.

Embora compostos hidróxi que compõe a composição de hidróxi a possam ser completamente idênticos, parcialmente idênticos ou diferentes da composição de hidróxi usada em etapa (B), etapa (R) ou etapa (P) (composição composta do composto hidróxi aromático e/ou álcool que compõe a composição de hidróxi aromático), a fim de facilitar o procedimento, a composição de hidróxi a é preferivelmente quer a mesma como a composição de hidróxi usada em etapa (B) ou etapa (P) ou é uma composição composta daquela composição de hidróxi. Embora uma explicação seja provida a seguir, a reação de etapa (A) é mais preferivelmente realizada na presença de uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2)), ou a reação de etapa (A) é realizada na presença de um álcool ou composição de hidróxi aromático seguida pela adição de uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2)). A etapa (A) é mais preferivelmente realizada na presença de uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2)). Embora apenas álcool possa ser usado no caso de realizar etapa (R) após etapa (A), neste caso, uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2)) é adicionado após realizar a reação de etapa (A).

Embora os solventes de reação indicados aqui possam ser usados

em um quantidade arbitrária, no caso de usar um álcool para o solvente de reação, pode ser usado em uma razão estequiométrica dentro de uma faixa maior que 1 vez para menos que 100 vezes baseado nos grupos amino da amina primária orgânica. Embora seja preferível usar um excesso de álcool com base nos grupos amino da amina primária orgânica a fim de melhorar a fluidez do líquido de reação e permite a reação prosseguir eficientemente, uma vez que problemas podem resultar tais como um aumento no tamanho do reator se um quantidade muito excessiva de álcool é usada, o álcool pode ser usado em uma razão estequiométrica mais preferivelmente dentro de uma faixa maior que 5 vezes para menos que 50 vezes e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa maior que 8 vezes a menos que 20 vezes os grupos amino da amina primária orgânica.

Além disso, no caso de usar uma composição de hidróxi aromático para o solvente de reação de etapa (A), ela pode ser usada em uma razão estequiométrica dentro de uma faixa maior que 1 vez para menos que 100 vezes os grupos amino da amina primária orgânica. Embora seja preferível usar um excesso de álcool com base nos grupos amino da amina primária orgânica a fim de melhorar a fluidez do líquido de reação e permitir a reação prosseguir eficientemente, uma vez que problemas podem resultar tais como um aumento no tamanho do reator se um quantidade muito excessiva de álcool é usado, álcool pode ser usado em uma razão estequiométrica mais preferivelmente dentro de uma faixa maior que 2 vezes para menos que 50 vezes e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa maior que 3 vezes para menos que 20 vezes os grupos amino da amina primária orgânica.

Entre os compostos hidróxi representados por compostos selecionados dentre álcoois representados por uma fórmula mencionada acima (4) e compostos hidróxi aromático representados por fórmula (2), um composto hidróxi aromático é usado preferivelmente em consideração de solubilidade do

composto tendo grupos ureído formados. Por exemplo, embora Publicação de Patente Examinada Japonesa No. H2-48539 descreve ao efeito que um composto tendo grupos ureído é fracamente solúvel em n-butanol, com relação a este ponto, compostos hidróxi aromático frequentemente têm solubilidade superior dos compostos tendo grupos ureído. Ademais, compostos hidróxi aromático também demonstram o efeito de promover reações entre amina primária orgânica e uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído). Embora o mecanismo pelo qual este efeito é demonstrado não esteja claro, supôs-se pelos inventores da presente invenção que, embora uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) geralmente tendem a adotar um estado associado devido a ligação de hidrogênio, compostos hidróxi aromático têm grupos hidróxi acídicos, e os grupos hidróxi inibem associação entre a uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído), assim tornando mais fácil para aminas aproximar-se dos sítios de reação da uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) (que são presumidos para serem carbonos que compõe os grupos carbonila da uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído)).

No caso de usar uma composição de hidróxi aromático para o solvente de reação, embora um composto hidróxi aromático possa ser usado sozinho ou misturado com outros solventes, a quantidade do composto hidróxi aromático usado está dentro da faixa dos valores previamente descritos. No caso de adicionar uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2)) após ter realizado etapa (A) na presença de álcool também, a composição de hidróxi aromático é usada dentro das faixas previamente descritas. Nesta vez, a quantidade de álcool usada durante a reação de etapa (A) é também usada na razão estequiométrica indicada para o composto hidróxi aromático baseada na amina primária orgânica como previamente descrito. No caso de usar água em etapa (A), a água é preferivelmente usada junto com uma

composição de hidróxi aromático e/ou álcool. Embora água sozinha possa ser usada como um solvente, pode ser necessário remover a água seguindo conclusão de etapa (A). Quando um composto hidróxi aromático na quantidade descrita acima é adicionado para obter uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído usando um composto tendo grupos ureído obtidos em etapa (A), há casos em que o líquido de reação separa em uma fase aquosa e fase orgânica ou o composto hidróxi aromático e composto tendo grupos ureído solidificam. Além disso, quando etapa (R) ou etapa (B) é realizada após adicionar o composto hidróxi aromático na quantidade descrita acima seguindo conclusão de etapa (A), um líquido homogêneo pode não estar apto a ser transferido ou bombas de transferência e linhas podem tornar-se entupidas pelas razões descritas acima. Deste modo, no caso de usar apenas água para o solvente em etapa (A), a água é removida antes ou após adicionar o composto hidróxi aromático. Embora variando de acordo com os compostos usados e composição, água é removida até a quantidade de água estar dentro de uma faixa de 10 ppm a 10% em peso, preferivelmente de 10 ppm a 5% em peso e mais preferivelmente de 10 ppm a 2% em peso no líquido de reação (ou líquido misturando) segundo remoção deste. O método conhecido para remover água pode ser usado para o método de remoção de água, e exemplos de métodos que podem ser usados podem preferivelmente incluir remoção por destilação em uma pressão reduzida ou uma pressão normal, o uso de um adsorvente tais como zeólito, a adição de um composto hidrolisável tais como um acetal seguido por remoção de água por uma reação de hidrólise, e remoção de água com um composto que reage com água da maneira de N,N-diciclo-hexilcarbodiimida. Água é mais preferivelmente removida por destilação. No caso de usar água junto com uma composição de hidróxi aromático e/ou álcool como um solvente em etapa (A), a quantidade de água na reação está dentro de uma faixa de 10 ppm a 10% em peso,

preferivelmente de 10 ppm a 5% em peso, e mais preferivelmente de 10 ppm a 2% em peso. Os inventores da presente invenção surpreendentemente verificaram que a reação de etapa (A) demonstra uma melhoria em taxa de reação devido à presença de água. Deste modo, tendo água presente durante a reação é um método preferível. Embora os detalhes deste efeito não tenham sido determinados, é presumido que a água demonstra o efeito de aumentar a nucleofilicidade da amina primária orgânica.

Não existem limitações particulares no aparelho de reação usado quando realizando a reação, e o reator conhecido pode ser usado. Por exemplo, reatores convencionalmente conhecidos podem ser adequadamente combinados, tais como um tanque de agitação, um tanque de agitação pressurizado, um tanque de agitação despressurizado, um reator tipo coluna, uma coluna de destilação, uma coluna recheada ou um destilador de película fina. Um reator tipo tanque provido com um agitador é usado preferivelmente. Não existem limitações particulares no material dos reatores, e materiais conhecidos podem ser usados. Exemplos destes podem incluir vidro, aço inoxidável, aço carbono, Hastelloy, materiais base revestidos com vidro e materiais revestidos com Teflon (marca registrada). Materiais tais como SUS304, SUS316 ou SUS316L são baratos e podem ser usados preferivelmente. Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou um condensador e semelhantes pode ser adicionado como necessário, um método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser usado para aquecer, e um método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriar. Etapas podem também ser adicionadas como necessário. Por exemplo, etapas e aparelhos capazes de serem projetados por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser adicionados, tais como uma etapa de remover a amônia formada, uma etapa de purificar a amina primária

orgânica, uma etapa de dissolver a uréia no composto hidróxi aromático, uma etapa de dissolver o composto hidróxi aromático, uma etapa de separar o álcool, uma etapa de separar e/ou purificar o composto hidróxi aromático, uma etapa de purificar o composto tendo grupos ureído a partir do líquido de reação formado ou uma etapa de incinerar ou descartar subprodutos e semelhantes.

No caso de usar um solvente de reação em etapa (A), o solvente de reação pode ser removido a partir do líquido de reação de etapa (A) então preparando a composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído para uma composição desejada ou anterior a efetuar a etapa (B) ou etapa (R), ou a composição pode ser preparada ou a etapa pode ser realizada sem remover o solvente de reação. Em particular, o composto hidróxi usado como um solvente de reação é etapa (A) é preferivelmente usado como é como uma porção da composição de hidróxi de etapa (B) ou etapa (R).

Amônia formada como um subproduto na etapa (A) pode ser recuperada na forma de gás amônia introduzindo em um condensador provido no reator em uma pressão reduzida ou uma pressão normal, e condensando toda ou uma porção da composição de hidróxi usada em etapa (A) com um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia.

Na presente forma de realização, realizando um processo que inclui uma etapa de esterificar, ou esterificar e transesterificar um composto tendo grupos ureído (e preferivelmente um composto tendo grupos ureído N-substituídos) e uma composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) (isto é, um processo que inclui etapa (B) ou etapa (R) e etapa (P)), exemplos de aspectos de um método para produzir pelo menos um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático (em que o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído refere-se a um éster de ácido carbâmico N-substituído em que um

átomo de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) é ligado a um anel aromático) incluem os cinco aspectos indicados abaixo se o método adicionalmente inclui um método para realizar etapa (C). Outros aspectos são também possíveis baseados na presente forma de realização, e a presente forma de realização não é limitada aos cinco aspectos indicados abaixo.

Exemplos de aspectos da presente forma de realização podem incluir as cinco vias seguintes que são realizadas após obter um composto tendo grupos ureído ou após obter pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído (ou líquido de reação contendo um composto tendo grupos ureído) realizando etapa (A):

via 1) método para realizar etapa (B);

via 2) método para realizar etapa (B) e então etapa (C);

via 3) método para realizar etapa (R) e então etapa (P)

via 4) método para realizar etapa (R), etapa (P) e então etapa (C);

e,

via 5) método para realizar etapa (R), etapa (C) e então etapa (P).

Um método que inclui etapa (B) é um método para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir de um composto tendo grupos ureído (ou líquido de reação contendo um composto tendo grupos ureído) e uma composição de hidróxi aromático por uma reação de esterificação, enquanto um método que inclui etapa (R) é um método para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído esterificando um composto tendo grupos ureído e um álcool para obter um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, e então transesterificar o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e composição de hidróxi aromático em uma etapa que inclui etapa (P).

Em qualquer dos métodos mencionados acima, O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é obtido a partir do composto tendo os grupos ureído (ou após obter o mesmo) e a composição de hidróxi aromático.

Uma explicação é primeiro dada de via 1).

<Via 1)>

Via 1) compreende um método para realizar etapa (B).

Via 1) é um método para produzir um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático ou a partir de um composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído.

<Etapa (B)>

Etapa (B): Uma etapa de obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo o pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo ou composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)) em uma fase líquida e então extraindo amônia formada como um subproduto para uma fase gasosa (a reação é uma reação de esterificação).

Pelo menos um tipo de composto tendo os grupos ureído pode ser um composto tendo grupos ureído produzidos usando o método conhecido provido é o composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1). É preferivelmente pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído produzidos em etapa (A) ou um líquido de reação contendo pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído produzidos em etapa (A). O líquido de reação refere-se ao líquido resultando a partir de finalização da reação de etapa (A) e/ou um líquido de reação em que foi adicionado uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)) após ter realizado a reação de etapa (A) na presença de um álcool ou composição de hidróxi aromático, e representa um líquido de reação contendo pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído e uma composição hidróxi. Alternativamente, uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído como

previamente explicado pode ser usada no lugar do líquido de reação contendo pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído produzido na etapa (A) mencionada acima, e este método é também um aspecto da presente forma de realização.

Etapa (B) pode ser uma etapa de produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído esterificando um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático, e é um aspecto preferível. FIG. 2 mostra um desenho conceitual descrevendo a etapa (B).

A amina primária orgânica usada nesta via é uma amina primária orgânica representada por fórmula (3), o composto tendo os grupos ureído obtidos em etapa (A) desta via é um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) derivado da amina primária orgânica, e o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (B) desta via é um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado por fórmula (43) derivado do composto tendo grupos ureído. Indicações de exemplos específicos de cada um destes compostos estão respectivamente contidas em explicações prévias dos mesmos.

Como foi previamente descrito, no caso a composição de hidróxi a usada como um solvente de reação em etapa (A) é a mesma como a composição de hidróxi de etapa (B) (isto é, composição contendo um álcool representado por fórmula (4) e/ou um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2) que contém a composição de hidróxi aromático usada em etapa (B)), etapa (B) pode ser realizada como é usando o líquido de reação obtido em etapa (A). Além disso, no caso a composição de hidróxi a usada como um solvente de reação em etapa (A) difere a partir da composição de hidróxi de etapa (B), etapa (B) pode ser realizada após recém adicionar um composto hidróxi ao líquido de reação obtido em etapa (A), um ou uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi podem ser recém adicionados ao líquido de reação

obtido em etapa (A) seguido por realização da etapa (B) após separar toda ou uma porção da composição de hidróxi usada como um solvente de reação de etapa (A), ou etapa (B) pode ser realizada após remover toda ou uma porção da composição de hidróxi usada como um solvente de reação em etapa (A) seguido por uma recém adicionada ou uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi. Aqui, o composto hidróxi recém adicionado é uma composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado por uma fórmula mencionada acima (2).

Dentre estes, a composição de hidróxi aromático usada em etapa (B) é preferivelmente uma composição de hidróxi aromático contendo um composto hidróxi aromático representado por fórmula (7) ou fórmula (31), e mais preferivelmente uma composição de hidróxi aromático contendo um composto hidróxi aromático ativo, e ainda mais preferivelmente uma composição de hidróxi aromático representada por fórmula (32) e ainda mais preferivelmente por fórmula (38) a fim de conduzir etapa (B). Como foi previamente descrito, um método para produzir O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído usando um composto tendo grupos ureído e reagindo com álcool é descrito em pedido de patente japonesa acessível ao público No. H6-41045. Como foi previamente explicado, este O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído é suscetível a desnaturação térmica e facilmente forma um composto tendo grupos ureileno. Além disso, se o O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído é submetido à decomposição térmica em um tentativa para produzir isocianato, a temperatura de decomposição térmica torna-se elevada e uma reação reversa da reação de decomposição térmica ocorre facilmente. Como um resultado de estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, no caso de obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e um composto hidróxi aromático, foi verificado que O-aril éster de ácido carbâmico

N-substituído pode ser obtido em rendimento elevado sem passar por desnaturação térmica.

Não existem limitações particulares no método para separar o solvente de reação usado em etapa (A), e embora um método conhecido tal como separação destilativa, separação de membrana ou separação de extração possa ser usado, separação destilativa é preferível. No caso de realizar etapa (B) após ter realizado etapa (A), há casos em que etapa (A) é preferivelmente realizada na presença de uma composição de hidróxi aromático, e há também casos em que etapa (A) é preferivelmente realizada na ausência de álcool e na presença de uma composição de hidróxi aromático. Como foi previamente descrito, no caso de usar um composto tendo grupos ureído para a matéria prima inicial também, existem muitos casos em que O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído é suscetível a desnaturação térmica. Como um resultado de estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, mesmo se um álcool é usado em etapa (A) e uma quantidade de traço de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é formada em etapa (B), desnaturação foi encontrada para ser significantemente inibida mesmo na presença de uma composição de hidróxi aromático.

No caso de realizar etapa (B) na presença de álcool, uma vez que existem casos em que uma quantidade de traço de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é formada junto com O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, o álcool é preferivelmente removido antes de realizar etapa (B) ou simultâneo a realizar etapa (B). Uma vez que O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é um composto que tem uma temperatura de decomposição térmica mais elevada quando realizando etapa (F) como comparado com O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, no caso de via 1) ou via 2) que inclui etapa (B), álcool é preferivelmente não usado em etapa (A) sempre que possível (isto é, álcool não é usado ao longo de toda etapa) para inibir a

quantidade de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído formado.

Embora variando de acordo com os compostos reagido, as condições de reação para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático de etapa (B) são tais que a quantidade de composto hidróxi aromático na composição de hidróxi aromático usada tem uma razão estequiométrica dentro de uma faixa de 1 a 500 vezes com base nos grupos ureído do composto tendo grupos ureído usados. Embora seja preferível usar um excesso de composto hidróxi aromático uma vez que compostos carbonila complexamente substituídos e compostos de pesos moleculares elevados tendo ligações carbonila em moléculas dos mesmos se formam facilmente se a razão estequiométrica for menor que 1 vez, em consideração do tamanho do reator, a razão estequiométrica está preferivelmente dentro de uma faixa de 1 a 100 vezes, mais preferivelmente dentro de uma faixa de 2 a 50 vezes e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa de 3 a 20 vezes.

Embora variando de acordo com os compostos usados, a temperatura de reação está preferivelmente dentro de uma faixa de 100 a 350°C. Se a temperatura é menor que 100°C, a reação fica lenta ou a reação raramente prossegue de qualquer modo, ou compostos carbonila complexamente substituídos aumentam, assim tornando isso indesejável. Por outro lado, em temperaturas maiores que 350°C, o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído quer permanece em etapa (A), a uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) formada no sistema de etapa (B) decompõe, a composição de hidróxi é submetida a reações de desnaturação desidrogenativa, ou decomposição e desnaturação do produto na forma de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído ocorrem facilmente, assim tornando isso indesejável. A partir de tais pontos de vista, a temperatura de reação está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 120 a 320°C e ainda mais

preferivelmente dentro de uma faixa de 140 a 300°C.

Como foi previamente descrito, a reação pela qual O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é formado é uma reação de equilíbrio, e uma vez que a reação é inclinada para o lado de reagentes, a reação é preferivelmente realizada enquanto removendo amônia formada como um subproduto para fora do sistema tanto quanto possível. Amônia é preferivelmente removida de modo que a concentração de amônia no líquido de reação é preferivelmente 1000 ppm ou menos, mais preferivelmente 300 ppm ou menos, ainda mais preferivelmente 100 ppm ou menos e mais preferivelmente 30 ppm ou menos (estar contida no líquido de reação refere-se a estar contida em uma fase líquida quando realizando a etapa (B)). Amônia pode ser removida usando métodos tais como destilação reativa, uso de um gás inerte, separação de membrana e separação adsortiva. Por exemplo, a destilação reativa refere-se a um método para separar amônia continuamente formada durante a reação por destilação na forma de um gás. Esta pode ser realizada enquanto aquecendo um composto hidróxi aromático, solvente ou composição de hidróxi a fim de aumentar a eficiência de destilação da amônia. Além disso, um método usando um gás inerte refere-se a um método para separar amônia continuamente formada durante a reação a partir do sistema de reação na forma de um gás junto com o gás inerte. Exemplos de gases inertes usados podem incluir nitrogênio, hélio, argônio, dióxido de carbono, metano, etano e propano, estes podem ser usados sozinhos ou como uma mistura, e um método em que o gás inerte é introduzido no sistema de reação é preferível. Exemplos de adsorventes usados em métodos usando separação adsortiva podem incluir adsorventes aptos a serem usados sob as condições de temperatura em que a reação é realizada, tais como sílica, alumina, vários tipos de zeólito ou terra diatomácea. Estes métodos para remover amônia para fora do sistema podem ser realizados sozinhos ou uma pluralidade de tipos pode ser realizada em

combinação.

Um catalisador pode ser usado na reação para o propósito de aumentar a taxa de reação, por exemplo. Exemplos de catalisadores que são usados preferivelmente podem incluir catalisadores básicos tais como metilatos, etilatos ou butiratos (incluindo isômeros) de lítio, sódio, potássio, cálcio ou bário, elementos terrosos raros, antimônio ou bismuto sozinho ou óxidos, sulfetos e sais destes, boro sozinho ou compostos de boro, metais da família de cobre, família de zinco, família de alumínio, família de carbono e família de titânio na tabela periódica bem como óxidos de metal e sulfetos destes, e carbetos e nitretos de elementos da família de carbono excluindo carbono, família de titânio, família de vanádio e família de cromo na tabela periódica. Embora não existam limitações particulares na quantidade de catalisador usada no caso de usar um catalisador, um catalisador pode ser usado dentro de uma faixa de uma razão estequiométrica de 0,0001 a 100 vezes os grupos ureído do composto tendo grupos ureído. Uma vez que existem muitos casos em que é necessário remover o catalisador se um catalisador é adicionado, a reação é preferivelmente realizada sem adicionar um catalisador.

Embora variando de acordo com a composição do sistema de reação, temperatura de reação, método usado para remover amônia, aparelho de reação e semelhantes, a pressão de reação está geralmente dentro de uma faixa de 0,01 Pa a 10 MPa (pressão absoluta), e em consideração de facilidade de aplicação industrial, a pressão de reação está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 0,1 Pa a 5 MPa (pressão absoluta), e em consideração de remover amônia gasosa para fora do sistema, ainda mais preferivelmente de 0,1 Pa a 1,5 MPa (pressão absoluta).

Embora variando de acordo com a composição do sistema de reação, temperatura de reação, método usado para remover amônia, aparelho de reação, pressão de reação e semelhantes, o tempo de reação (tempo de

residência no caso de uma reação contínua) é geralmente de 0,01 a 100 horas. O tempo de reação pode também ser determinado de acordo com a quantidade formada do composto alvo na forma de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído). Por exemplo, a reação pode ser parada após ter amostrado o líquido de reação, determinado o teor de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído) no líquido de reação e confirmar que o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído foi formado em um rendimento de 10% ou mais com base no composto tendo grupos ureído, ou a reação pode ser parada após ter confirmado que o rendimento é 90% ou mais. Isocianato é obtido aplicando o líquido de reação contendo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em etapa (B) à reação de decomposição térmica em etapa (F). Nesta vez, se o teor de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é baixo (isto é, rendimento é baixo) em etapa (B), uma diminuição no rendimento de isocianato pode resultar. Deste modo, o rendimento é preferivelmente 50% ou mais, mais preferivelmente 80% ou mais e ainda mais preferivelmente 90% ou mais.

Embora o uso de um solvente de reação não seja necessariamente requerido na reação, um solvente adequado é preferivelmente usado como um solvente de reação para o propósito de facilitar o procedimento de reação, exemplos dos quais incluem alcanos tais como pentano (incluindo isômeros), hexano (incluindo isômeros), heptano (incluindo isômeros), octano (incluindo isômeros), nonano (incluindo isômeros) ou decano (incluindo isômeros); hidrocarbonetos aromáticos e hidrocarbonetos aromáticos substituídos de alquila tais como benzeno, tolueno, xileno (incluindo isômeros), etil benzeno, diisopropil benzeno (incluindo isômeros), dibutil benzeno (incluindo isômeros)

ou naftaleno; compostos nitrila tais como acetonitrila ou benzonitrila; compostos aromáticos substituídos com um grupo halogênio ou nitro tais como clorobenzeno, diclorobenzeno (incluindo isômeros), bromobenzeno, dibromobenzeno (incluindo isômeros), cloronaftaleno, bromonaftaleno, nitrobenzeno ou nitronaftaleno; compostos de hidrocarboneto policíclico tais como difenila, difenila substituída, difenil metano, terfenila, antraceno ou dibenzil tolueno (incluindo isômeros); hidrocarbonetos alifáticos tais como ciclo-hexano, ciclopentano, ciclooctano ou etilciclo-hexano; cetonas tais como metil etil cetona ou acetofenona; ésteres tais como ftalato de dibutila, ftalato de dihexila, ftalato de dioctila ou ftalato de benzilbutila; éteres e tioéteres tais como tetrahidrofurano, 1,4-dioxano, 1,2-dimetoxietano, difenil éter ou sulfeto de difenila; compostos cetona tais como acetona ou metil etil cetona; compostos éster tais como acetato de etila ou benzoato de etila; e sulfóxidos tais como dimetilsulfóxido ou difenilsulfóxido. Naturalmente, uma composição de hidróxi usada em excesso na reação é também preferivelmente usada como um solvente de reação.

A reação é realizada em um sistema tendo uma fase gasosa contendo uma composição hidróxi, um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia (um composto que herda um grupo carbonila possuído por uréia, tais como um éster de ácido carbâmico não N-substituído ou biureto, que se refere a um composto excluindo O-ésteres de ácido carbâmico N-substituído) e amônia produzida como um subproduto na reação, e uma fase líquida em que a reação é realizada. Embora a maior parte da reação seja realizada na fase líquida, ela pode também ser realizada na fase gasosa dependendo das condições de reação. Nesta vez, o conteúdo volumétrico da fase líquida na reação em que a reação é realizada é preferivelmente 50% ou menos. No caso de realizar a reação continuamente durante um longo período de tempo, embora subprodutos poliméricos podem se formar devido a

flutuações em condições de operação (tais como temperatura ou pressão) e semelhantes, se o conteúdo volumétrico da fase líquida no reator é elevado, adesão e acúmulo de tais subprodutos poliméricos no reator podem ser evitados. No entanto, uma vez que a eficiência de remoção de subproduto amônia pode tornar-se pobre e o rendimento do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído pode diminuir se o conteúdo volumétrico da fase líquida é excessivamente elevado, o conteúdo volumétrico da fase líquida com base na fase gasosa é preferivelmente 50% ou menos, mais preferivelmente 30% ou menos e ainda mais preferivelmente 20% ou menos (o conteúdo volumétrico da fase líquida refere-se a uma razão volumétrica da fase líquida baseada no volume do tanque de reação no caso de um reator tipo tanque, o volume do estágio menor que o estágio de alimentação (não incluindo o fundo de tanque e refervedor) no caso de um reator tipo coluna, ou o volume do destilador de película fina no caso de um destilador de película fina).

Embora não existam limitações particulares sobre o aparelho de reação usado quando realizando a reação e um reator conhecido pode ser usado, um reator de tipo tanque e/ou de tipo coluna é usado preferivelmente. O reator usado é preferivelmente equipado com um condensador.

Como foi previamente descrito, a reação é preferivelmente realizada em um sistema contendo uma fase gasosa contendo uma composição hidróxi, um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia e amônia produzida como um subproduto na reação, e uma fase líquida em que a reação é realizada sob condições tal que o conteúdo volumétrico da fase líquida no reator em que a reação é realizada é 50% ou menos, e um reator que atende a estas condições é selecionado para o reator em que a reação é realizada.

Mais especificamente, reatores convencionalmente conhecidos podem ser adequadamente combinados e usados, exemplos dos quais podem incluir um tanque de agitação, um tanque de agitação pressurizado, um tanque

de agitação despressurizado, um reator tipo coluna, uma coluna de destilação, uma coluna recheada ou um destilador de película fina.

Não existem limitações particulares no tipo de condensador provido no reator e o condensador conhecido pode ser usado. Por exemplo, convencionalmente condensadores conhecidos tais como um condensador cilíndrico multitubular, um condensador de tubo duplo, um condensador de tubo simples ou um condensador resfriado por ar podem ser adequadamente combinados e usados. O condensador pode ser provido dentro do reator ou fora do reator, ou pode ser conectado com o reator por uma linha, e vários tipos podem ser empregados em consideração das formas do reator e condensador, a maneira em que o líquido condensado é manuseado e semelhantes.

Não existem limitações particulares sobre os materiais do reator e condensador e materiais conhecidos podem ser usados. Exemplos de materiais que podem ser usados podem incluir vidro, aço inoxidável, aço carbono, Hastelloy, materiais de base revestidos com vidro e materiais revestidos com Teflon (marca registrada). Materiais tais como SUS304, SUS316 ou SUS316L são baratos e podem ser usados preferivelmente. Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou um condensador e semelhantes podem ser adicionados como necessário, um método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser usado para aquecer, e um método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriamento. Etapas podem também ser adicionadas como necessário. Por exemplo, etapas e aparelhos aptos a serem projetados por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser adicionados, tais como uma etapa de dissolver o composto tendo grupos ureído na composição de hidróxi aromático, uma etapa de dissolver o composto hidróxi aromático, uma etapa de separar álcool, uma etapa de separar e/ou purificar o composto hidróxi

aromático, uma etapa de purificar O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir do líquido de reação formado, ou uma etapa de incinerar ou descartar subprodutos e semelhantes.

Etapa (B) é uma etapa de produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático em uma fase líquida usando um reator (equipado com um condensador). O componente gasoso formado na etapa (B) contendo um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia e amônia formada como um subproduto na reação é introduzido no condensador provido no reator e toda ou uma porção da composição de hidróxi aromático e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia são condensados, seguido por recuperação de amônia na forma de um gás. Nesta vez, o composto tendo grupos carbonila derivados de uréia que está contido em amônia recuperada como um gás a partir do condensador está presente em uma quantidade específica ou menos. Isto é, a razão do número de grupos carbonila (-C(=O)-) contido no composto tendo grupos carbonila derivados de uréia contida na amônia para o número de amônia moléculas é 1 ou menos, preferivelmente 0,5 ou menos, mais preferivelmente 0,1 ou menos e ainda mais preferivelmente 0,01 ou menos. A razão para levar a quantidade do composto tendo grupos carbonila derivados de uréia contida na amônia a estar dentro de uma faixa específica é evitar a adesão e o acúmulo de componentes sólidos na linha para transferir amônia a partir do condensador.

Embora todos os componentes sólidos que aderem e se acumulam na linha para transferir amônia não possam ser identificados, como um resultado de estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, a maioria foi determinada como sendo de compostos tendo grupos carbonila. Embora um método possível para evitar a adesão e o acúmulo de tais componentes sólidos incluir aquecer a linha para transferir amônia para

decompor compostos tendo grupos carbonila, de acordo com estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, existem muitos casos em que aquecer apenas causa polimerização de produtos de decomposição (tais como ácido isociânico) ou reação com outros compostos tendo grupos carbonila, assim tornando difícil evitar completamente adesão e acúmulo de componentes sólidos. Além disso, no caso de simplesmente aquecer a linha, foi determinado que compostos tendo grupos carbonila contidos na amônia e seus produtos de decomposição solidificam como um resultado de ser rapidamente resfriados na saída da linha para transferir amônia (tais como a porção em contato com a atmosfera), assim frequentemente resultando em proeminente adesão e acúmulo de componentes sólidos. Como um resultado de conduzir estudos extensivos com relação a este problema, os inventores da presente invenção surpreendentemente encontraram que o problema de adesão e acúmulo de componentes sólidos pode ser resolvido levando a quantidade do composto tendo grupos carbonila derivados de derivado de ácido carbônico contida na amônia a ser igual a ou menos que a quantidade específica descrito acima. Embora o mecanismo pelo qual este efeito é demonstrado não seja claro, os inventores da presente invenção supuseram que adesão e acúmulo na linha são causados pelo composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico sozinho, bem como produtos de decomposição e/ou de polimerização do composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico, e que levando a quantidade de grupos carbonila contidos no composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico igual a ou menos que uma concentração específica, adesão do composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico sozinha assim como as taxas de reação de decomposição e/ou polimerização do composto são diminuídas consideravelmente.

Por outro lado, a composição de hidróxi aromático condensada e

composto tendo grupos carbonila derivados de uréia são feitos para serem tal que a razão estequiométrica da composição de hidróxi aromático condensada para o composto condensado tendo grupos carbonila derivados de uréia é 1 ou mais, preferivelmente 2 ou mais e mais preferivelmente 3 ou mais. A razão para definir tais faixas é possibilitar uma mistura da composição de hidróxi aromático e do composto tendo grupos carbonila derivados de uréia condensados no condensador de modo a estar na forma de uma mistura líquida homogênea. Como um resultado, não apenas é manuseio da mistura mais fácil, mas ocorrência de problemas tais como adesão e acúmulo de componentes sólidos no condensador podem ser evitados.

Ademais, em etapa (B) a mistura da composição de hidróxi aromático e do composto tendo grupos carbonila derivados de uréia condensado pelo condensador pode ser circulada dentro do reator e reutilizada na reação de etapa (A). Neste momento, a concentração de amônia contida na mistura é preferivelmente 5000 ppm ou menos, mais preferivelmente 3000 ppm ou menos e ainda mais preferivelmente 2000 ppm ou menos.

Como foi descrito acima, embora vários compostos sejam recuperados na forma de compostos tendo grupos carbonila derivados de uréia, não existem limitações particulares na reutilização destes compostos.

<Via 2)>

Via 2) é um método para realizar etapa (B) seguido por realização da etapa (C). Via 2) é um aspecto do método indicado em via 1).

O método de via 2) é um método para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído de etapa (B) em que a amina primária orgânica é uma monoamina primária orgânica aromática representada pela seguinte fórmula (5), uma etapa (C) seguinte é realizada após etapa (B), e pelo menos duas moléculas do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos

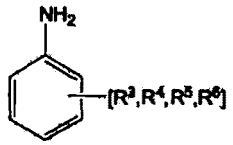
metileno (-CH_2-). Preferivelmente, o composto hidróxi aromático constituindo a composição de hidróxi aromático usada em etapa (A) e/ou etapa (B) é um composto mono-hidróxi aromático.

Etapa (C): uma etapa de obter O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-), reagindo o O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com formaldeído ou um agente de reticulação metilenante e grupos aromáticos de reticulação derivados da monoamina primária orgânica aromática contida no O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com os grupos metileno (-CH_2-)

O O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído na via 2) representa um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído formada como um subproduto no caso de usar um álcool em etapa (A) e/ou etapa (B).

Nesta via, etapa (A) é realizada usando uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula é usada para a amina primária orgânica para obter um composto tendo grupos ureído derivado da amina primária orgânica, após que etapa (B) é realizada para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído, seguido por realização da etapa (C). Isto é, a amina primária orgânica usada nesta via é uma amina primária orgânica representada por fórmula (5), o composto tendo grupos ureído obtidos em etapa (A) desta via é um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (41) derivado da amina primária orgânica, e mais especificamente um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (148), e o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (B) desta via é um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado por fórmula (43) derivado do composto tendo grupos ureído, e mais especificamente um O-aril éster de ácido

carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (149). Indicações de exemplos específicos de cada um destes compostos estão respectivamente contidas em explicações prévias dos mesmos.



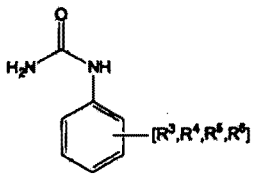
(5)

(em que

pelo menos um local na posição orto e/ou posição para do grupo NH_2 de uma monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) não é substituída, grupos R^3 a R^6 respectivamente representam um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel, grupos R^3 a R^6 podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^3 a R^6 podem juntos ligar-se para formar um anel com um anel aromático, grupos R^3 a R^6 são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre grupos compostos de grupos em que um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono de grupos R^3 a R^6 é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e o número total de átomos de carbono que compõe a monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) é um inteiro de 6 a 13).

Neste caso, o composto tendo grupos ureído obtidos em etapa (A) é pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído representado pela seguinte fórmula (148). Além disso, os grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 na seguinte fórmula (148) são selecionados a partir dos grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 de uma amina primária orgânica representada por uma fórmula mencionada acima (5), e o composto tendo grupos ureído é um composto em que grupos amino (-grupos NH_2) da amina primária orgânica representada por fórmula (5) são na

forma de grupos ureído (-NH-CO-NH_2):



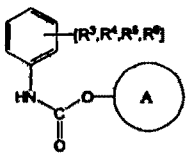
(148)

(em que

pelo menos um local na posição orto e/ou posição para do grupo ureído de uma monouréia orgânica aromática N-substituída representado por fórmula (148) não é substituída, grupos R^3 a R^6 respectivamente representam um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel, grupos R^3 a R^6 podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^3 a R^6 podem juntos ligar-se para formar um anel com um anel aromático, grupos R^3 a R^6 são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre grupos compostos de grupos em que um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono de grupos R^3 a R^6 é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e o número total de átomos de carbono que compõe a monouréia orgânica aromática N-substituída representado por fórmula (148), excluindo grupos ureído (-NH-CO-NH_2), é um inteiro de 6 a 13).

Neste caso, o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (B) é pelo menos um tipo de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (149). Além disso, os grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 na seguinte fórmula (149) são selecionados a partir dos grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 de uma amina primária orgânica representada por uma fórmula mencionada acima (5), e o composto é um composto em que grupos ureído (-NH-CO-NH_2) de um composto tendo grupos ureído representado por fórmula

(148) são na forma de grupos O-aril éster de ácido carbâmico:



(149)

(em que

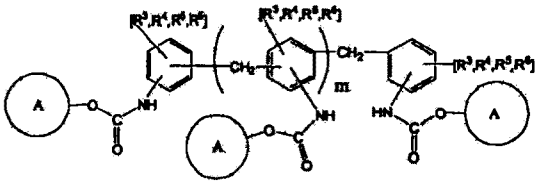
grupos R^3 a R^6 são os grupos indicados acima).

Em etapas (A) e (B) desta via, a amina primária orgânica usada é uma amina primária orgânica representada por fórmula (5), e etapas (A) e (B) desta via são realizadas sob as condições de etapas (A) e (B) de via 1).

Etapa (C) é uma etapa de obter O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-), por reticulação pelo menos um tipo de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (ou líquido de reação contendo o mesmo) obtido em etapa (B) com grupos metileno (-CH_2-). Como um resultado de realizar etapa (C), O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é obtido em que pelo menos duas moléculas de pelo menos um tipo de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (150) são reticuladas com os grupos metileno (-CH_2-). Aqui, quando realizando via 2), uma composição de hidróxi aromático contendo um composto mono-hidróxi aromático é preferivelmente usada para o composto hidróxi aromático usado em etapa (A) e/ou etapa (B) como previamente descrito (isto é, um composto hidróxi aromático em que b=1 no composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)). Embora um composto hidróxi aromático polivalente possa ser usado, reticulação pode ocorrer em locais diferentes dos locais desejados nesta vez. Na seguinte fórmula (150), no caso de usar o composto mono-hidróxi aromático mencionado acima (isto é no caso b=1), anel A da seguinte fórmula

não tem outro grupos hidróxi aromático ou grupos hidróxi alcóolico. Um composto hidróxi aromático representado por uma fórmula mencionada acima (31) é preferível para o composto mono-hidróxi aromático, o caso de usar um composto hidróxi aromático ativo, dos compostos hidróxi aromático ativos, representado por fórmula (38) é mais preferível, e o caso de usar um composto hidróxi aromático representado por fórmula (38), em que grupos R^{26} e R^{27} são átomos de hidrogênio enquanto outros substituintes são grupos alquila saturados lineares e/ou cíclicos, ou o caso de ser naftol (incluindo isômeros), fenoxifenol (incluindo isômeros) ou difenoxifenol (incluindo isômeros), em que a posição orto ou posição para do grupo hidróxi não é substituída, é ainda mais preferível.

Embora compostos em que m é um inteiro de 0 a 6 são representados pela fórmula (150), este valor pode ser ajustado de acordo com a quantidade usada e taxa de reação do agente de reticulação metilenante que é reagido (a ser subsequentemente explicado e frequentemente referido como um agente metilenante):



(150)

(em que

R^1 representa um grupo derivado de uma amina primária orgânica como previamente definido,

anel A representa um grupo derivado de um composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático como previamente definido, e que representa um resíduo em que um átomo de hidrogênio de grupos hidroxila diretamente ligado a um anel de hidrocarboneto aromático foi removido a partir do composto hidróxi aromático,

grupos R^3 a R^6 representam grupos como previamente definido, e m representa um inteiro de 0 a 6).

Embora um monoisocianato possa ser produzido aplicando o O-mono(aril éster) de ácido carbâmico N-substituído representado por uma fórmula mencionada acima (149) a uma reação de decomposição térmica como tal, quando considerando que isocianatos são tipicamente usados em aplicações tais como tinta e poliuretano, o isocianato é preferivelmente um isocianato polifuncional. Deste modo, um método pode ser realizado em que, após ter preliminarmente polimerizado o mono(aril éster) de ácido carbâmico N-substituído pela etapa (C) mencionada acima, o polímero é aplicado para uma reação de decomposição térmica para obter um isocianato polifuncional. O O-mono(aril éster) de ácido carbâmico N-substituído mencionado acima se refere a um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído tendo um grupo O-aril éster de ácido carbâmico em um molécula do mesmo.

O seguinte provê uma explicação da etapa (C). Na seguinte explicação, o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (B) de via 2) é frequentemente indicado como O-mono(aril éster) de ácido carbâmico N-substituído ou monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído.

O método conhecido (ver, por exemplo, Patente da República Federal da Alemanha No. 1042891) pode ser usado para a etapa (C).

Antes de realizar etapa (C), a composição de hidróxi aromático obtida em etapa (B) é separada a partir do líquido de reação contendo o resultando O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Embora etapa (C) pode ser realizada na presença de um composto hidróxi aromático, uma vez que o composto hidróxi aromático pode ser reticulado pelo agente de reticulação metilenante resultando na formação de subprodutos tais como compostos poli-hidróxi aromático, ou a quantidade de agente de reticulação metilenante usada pode aumentar, compostos hidróxi aromático são preferivelmente

separados. O método conhecido pode ser usado para o método de separação, e embora variando de acordo com os compostos usados, exemplos de métodos de separação que podem ser usados podem incluir um método de destilação, uma separação de extração método que usa a diferença em solubilidade entre o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e composto hidróxi aromático, e um método de filtração realizado solidificando quer o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído ou composto hidróxi aromático. Embora estes métodos não possam ser indicados especificamente uma vez que eles dependem das respectivas propriedades físicas dos compostos usados, o método e condições destes podem ser adequadamente selecionados dentro do escopo de conhecimento de uma pessoa versada na técnica.

Quando realizando etapa (C), o composto hidróxi aromático é removido até a quantidade de composto hidróxi aromático presente após o procedimento de separação mencionado acima é uma razão estequiométrica de 1 vez ou menos, preferivelmente 0,5 vezes e mais preferivelmente 0,1 vezes com base no O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Nesta vez, o composto hidróxi aromático pode ser removido na presença de solvente usado em etapa (C) a ser subsequentemente explicada.

Exemplos de agentes de reticulação metilenante preferivelmente usados na etapa (C) podem incluir formaldeído, paraformaldeído, trioxano, dialcoximetanos tendo um grupo alquila menor tendo 1 a 6 átomos de carbono (tais como dimetoximetano, dietoximetano, dipropoximetano, dipentanoximetano ou dihexiloximetano), e diaciloximetanos tendo um menor grupo carboxila tais como diacetoximetano ou dipropioximetano. Estes podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como uma mistura. Dentre estes agentes de reticulação metilenante, soluções aquosas de formaldeído são particularmente preferíveis em consideração de casos de aplicação industrial, facilidade de manuseio do agente de reticulação

metilenante e semelhantes.

Ao realizar a reação da etapa (C), embora não existam limitações particulares na razão de O-mono (aril éster) de ácido carbâmico N-substituído para agente de reticulação metilenante, o O-monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído é preferivelmente usado em uma razão estequiométrica de 2 a 20 vezes o agente de reticulação metilenante. Embora a formação de formas polinucleares (referindo-se a O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído em que três ou mais anéis aromáticos (anéis aromáticos derivados de amina primária orgânica) são ligados por uma estrutura reticulada de metileno, ou em outras palavras, compostos em que m é um inteiro de 1 ou mais na fórmula mencionada acima (150)), seja inibida com maior quantidade de monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído usada, se uma quantidade muito excessiva de monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído for usada, existem muitos casos em que a quantidade restante de O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído de matéria prima aumenta. Deste modo, a quantidade de monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído usada em termos da razão estequiométrica com o agente de reticulação metilenante está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 3 a 15 vezes e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa de 5 a 10 vezes.

Um catalisador ácido é preferivelmente usado como um catalisador na reação de condensação. Exemplos de catalisador ácidos podem incluir ácidos inorgânicos tais como ácido clorídrico, ácido sulfúrico, ácido fosfórico ou ácido bórico, e ácidos orgânicos tais como ácido fórmico, ácido acético, ácido oxálico ou ácido toluenossulfônico. Além disso, ácidos referidos como ácidos super fortes tais como ácido bromídrico, ácido perclórico, ácido clorossulfônico ou ácido trifluormetanossulfônico são também efetivos. Além disso, resinas de troca iônica tendo grupos acídicos tais como grupos carboxila ou grupos sulfonato bem como ácidos referidos como Ácidos de Lewis, tais

como ácido trifluorbórico, cloreto de ferro, cloreto de alumínio, cloreto de zinco ou cloreto de titânio, são também efetivos.

No caso de um ácido protônico tais como os ácidos inorgânicos mencionados acima, ácidos orgânicos ou ácidos super fortes, a quantidade destes ácidos usados está dentro de uma faixa de uma razão estequiométrica de 0,001 a 10, e preferivelmente dentro de uma faixa de 0,01 a 5, com base no éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima. Além disso, no caso estes ácidos são usados na forma de soluções aquosas, eles podem ser usados em uma concentração dentro de uma faixa de 10 a 95% em peso e preferivelmente dentro de uma faixa de 20 a 80% em peso com base na quantidade de água no sistema de reação. Se a concentração é menor que 10% em peso, a taxa de reação da reação de condensação torna-se extremamente baixa, enquanto se a concentração excede 95% em peso, hidrólise da matéria prima e outras reações laterais indesejáveis podem ocorrer.

A reação de condensação pode ser realizada na presença ou ausência de solvente. Exemplos de solventes que são usados preferivelmente podem incluir hidrocarbonetos lineares, ramificados ou cíclicos tais como pentano, hexano, heptano, octano, nonano, decano, hexadecano, ciclopentano ou ciclo-hexano; hidrocarbonetos aromáticos tais como benzeno, tolueno ou xileno e suas formas alquil-. halogeno- e nitro substituídas; hidrocarbonetos halogenados tais como clorofórmio, cloreto de metileno, tetracloreto de carbono, dicloroetano, tricloroetano ou tetracloroetano; alquil ésteres alifáticos tais como acetato de metila ou acetato de etila; e éteres tais como dietil éter, diisopropil éter, dioxano ou tetrahidrofurano. Além disso, tioacetais, acetais ou acilas são usados preferivelmente uma vez que eles não formam formaldeído livre sob as condições de reação e não substancialmente formam água reagindo com água formada como um subproduto na reação. Acetais e acilas são usados particularmente preferivelmente. Além disso, os ácidos mencionados acima pó

si só são também preferivelmente usados como solventes. Estes solventes podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como uma mistura.

Estes solventes podem ser usados em uma razão de peso dentro de uma faixa de 0,1 a 100 vezes e preferivelmente dentro de uma faixa de 0,2 a 50 vezes baseada na O-monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima.

A temperatura de reação é preferivelmente de 10 a 160°C, mais preferivelmente de 20 a 140°C e ainda mais preferivelmente de 50 a 120°C. Embora a reação é vantajosamente realizada em uma temperatura elevada a fim de aumentar a taxa de reação e completar a reação rapidamente, uma temperatura excessivamente elevada pode causar reações laterais indesejáveis tais como hidrólise.

Embora variando de acordo com o método de reação, compostos usados e condições de reação, o tempo de reação pode estar dentro de uma faixa de 1 minuto a 20 horas. Além disso, a reação pode ser terminada quando a redução na quantidade de monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima alcançou certo nível amostrando o líquido de reação e usando o método analítico conhecido tais como cromatografia líquida, ou a reação pode ser terminada quando o peso molecular médio do produto na forma de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído alcançou certo nível usando o método analítico conhecido tais como cromatografia de permeação de gel.

O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido pelo método descrito acima é um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado por uma fórmula mencionada acima (150). Embora aqueles O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído em que m é 0 são preferíveis em consideração facilidade de manuseio e particularmente viscosidade de solução e semelhantes, não há problemas com conter formas trinucleares ou

polinucleares maiores (isto é, compostos representados por fórmula (150) em que m é 1 ou mais) desde que eles não contradigam o significado da presente forma de realização.

O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (C) é preferivelmente usado em etapa (F).

Compostos permanecendo no líquido de reação de etapa (C) podem ser removidos a partir do líquido de reação (tais como o agente metilenante, solvente de reação ou catalisador usado em etapa (C)). O método conhecido pode ser usado para o método de remoção, e embora exemplos de tais métodos possam incluir separação de membrana, separação destilativa e cristalização, separação destilativa é preferível. No caso de remover um composto permanecendo no líquido de reação de etapa (C) por separação destilativa, adicionando a composição de hidróxi aromático usada na subsequente etapa (F) para o líquido de reação de etapa (C) para obter um líquido misturando, seguido pela remoção dos compostos permanecendo no líquido de reação de etapa (C) (tais como o agente metilenante, solvente de reação ou catalisador usado em etapa (C)) a partir do líquido misturando, separação destilativa pode ser realizada sem causar precipitação do éster de ácido carbâmico N-substituído, assim fazer este método preferível.

Embora cuidado seja necessário com relação aos materiais do reator e do condensador uma vez que um ácido é usado em etapa (C), não existem limitações particulares nos materiais desde que eles não possam causar problemas tais como corrosão atribuível aos compostos usados em etapa (C), e materiais conhecidos podem ser usados. Exemplos de materiais que podem ser usados podem incluir vidro, aço inoxidável, aço carbono, Hastelloy, materiais base revestidos com vidro e materiais revestidos com Teflon (marca registrada). Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou

um condensador e semelhantes podem ser adicionados como necessário, o método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser usado para aquecer, e o método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriar. Etapas podem também ser adicionadas como necessário, e, por exemplo, etapas e aparelhos aptos a serem projetados por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser adicionados.

<Via 3)>

Via 3) é uma via que inclui um método para realizar etapa (R) seguido por realização da etapa (P).

Primeiro, O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é obtido em etapa (R) usando um composto tendo grupos ureído, após que o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático são reagidos em etapa (P) para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Alternativamente, um composto tendo grupos ureído (ou líquido de reação contendo o mesmo) é obtido em etapa (A) e etapa (R) é realizada usando o composto tendo grupos ureído (ou líquido de reação contendo o mesmo) seguido por realização da etapa (P) para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído.

<Etapa (R)>

Etapa de produção de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído

Etapa (R) é uma etapa de produzir O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído com álcool. Alternativamente, O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é produzido reagindo (esterificando) um composto tendo grupos ureído (ou líquido de reação contendo o mesmo) obtido em etapa (A) com um álcool.

FIG. 3 é um desenho conceitual descrevendo a etapa (R).

O composto tendo grupos ureído obtidos em etapa (A) desta via é

um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) que é derivado da amina primária orgânica, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) desta via é um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representado por fórmula (49) que é derivado do composto tendo grupos ureído e um álcool, e o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (P) desta via é um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado por fórmula (43) que é derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático.

Como foi previamente afirmado, no caso a composição de hidróxi a usada como um solvente de reação em etapa (A) é a mesma como a composição de hidróxi de etapa (R) (isto é, uma composição contendo um álcool representado por fórmula (4), incluindo o álcool representado por fórmula (4) usada em etapa (R), e/ou um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)), etapa (R) pode ser realizada diretamente usando o líquido de reação obtido em etapa (A). Além disso, no caso a composição de hidróxi a usada como um solvente de reação em etapa (A) difere a partir da composição de hidróxi de etapa (R), etapa (R) pode ser realizada após recém adicionar um composto hidróxi (álcool representado por fórmula (4) e/ou composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)) para o líquido de reação obtido em etapa (A), um ou uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi podem ser recém adicionados para o líquido de reação obtido em etapa (A) seguido por realização da etapa (R) após separar toda ou uma porção da composição de hidróxi usada como um solvente de reação de etapa (A), ou etapa (R) pode ser realizado após remover toda ou uma porção da composição de hidróxi usada como um solvente de reação em etapa (A) seguido por recém adicionar um ou uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi. Aqui, o composto hidróxi recém adicionado é um álcool representado por fórmula (4) e/ou uma composição de hidróxi aromático. Não existem limitações

particulares no método para separar o solvente de reação usado em etapa (A), e embora o método conhecido tal como separação destilativa, separação de membrana ou separação de extração possa ser usado, separação destilativa é preferível. No caso de realizar etapa (R) após ter realizado etapa (A), há casos em que etapa (A) é preferivelmente realizada na presença de um álcool, e há também casos em que etapa (A) é preferivelmente realizada na ausência de uma composição de hidróxi aromático e na presença de álcool. No caso de realizar etapa (R) na presença de um composto hidróxi aromático, embora haja casos em que uma quantidade de traço de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é formada junto com O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, no método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído da presente forma de realização, após realizar etapa (R) isso não apresenta nenhum tipo de problema uma vez que o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é convertido para O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído realizando uma etapa (P) para ser subsequentemente explicado.

Como foi previamente descrito, com relação a um método para produzir O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído usando um composto tendo grupos ureído e reagindo com álcool, um método que coincide com o objetivo de obter um correspondente isocianato e álcool por decomposição térmica do O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído é descrito em pedido de patente japonesa acessível ao público No. H6-41045. Como foi previamente explicado, este método é suscetível à formação de subprodutos quando obtendo um composto tendo grupos ureído, contém uma faixa durante em que em que uma quantidade grande de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído é simultaneamente formada, e o O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído é suscetível a desnaturação térmica causando compostos ter grupos ureileno ser facilmente formados. Além disso, se isocianato é tentado ser produzido termicamente decompondo o O-alquil éster

de ácido carbâmico N-substituído, a temperatura de decomposição térmica torna-se mais elevada resultando em suscetibilidade aumentada para uma reação reversa da reação de decomposição térmica e suscetibilidade aumentada para a ocorrência de entupimento do reator de decomposição térmica. Como um resultado de estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, no caso de obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e um composto hidróxi aromático, foi verificado que O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído pode ser obtido em rendimento elevado com pequena desnaturação térmica.

Por outro lado, embora existam muitos casos em que compostos tendo grupos ureileno e semelhantes são formados como subprodutos mesmo em casos de obter O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído a partir de um composto tendo grupos ureído e álcool, quando obtendo O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído a partir de um composto tendo grupos ureído e álcool, foi verificado que a formação de subprodutos pode ser inibida consideravelmente se um composto hidróxi aromático é presente. Embora isso é pensado ser devido a associação do composto tendo grupos ureído inibindo o composto hidróxi aromático assim inibindo reações colaterais, tal descoberta não está presente na técnica anterior e é um efeito que foi primeiro descoberto pelos inventores da presente invenção. Deste modo, embora dependendo do caso particular, etapa (R) é preferivelmente realizada na presença de uma composição de hidróxi aromático ou composto hidróxi aromático quando realizando etapa (R) também. Neste caso, a composição de hidróxi aromático ou composto hidróxi aromático é selecionado dentre compostos hidróxi aromático representados por fórmula (2), e é preferivelmente um composto hidróxi aromático representado por fórmula (7), e mais preferivelmente um composto hidróxi aromático representado por fórmula (31). Embora um método preferível para usar uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi

aromático serão subsequentemente explicados, o composto hidróxi aromático ou composição de hidróxi aromático é preferivelmente selecionada de acordo com os critérios explicados nela.

Embora variando de acordo com os compostos reagidos, as condições de reação para produzir O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e um álcool de etapa (R) são tais que a quantidade de álcool usada tem uma razão estequiométrica dentro de uma faixa de 1 a 500 vezes com base nos grupos ureído do composto tendo grupos ureído usados. Embora seja preferível usar um excesso de álcool uma vez que compostos carbonila complexamente substituídos e compostos de peso molecular elevados tendo ligações carbonila em moléculas destas formam facilmente se a razão estequiométrica é menor que 1 vez, em consideração do tamanho do reator, a razão estequiométrica está preferivelmente dentro de uma faixa de 1 a 100 vezes, mais preferivelmente dentro de uma faixa de 5 a 50 vezes e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa de 8 a 20 vezes.

Embora variando de acordo com os compostos usados, a temperatura de reação está preferivelmente dentro de uma faixa de 100 a 350°C. Se a temperatura é menor que 100°C, a reação fica lenta ou a reação dificilmente prossegue de qualquer modo, ou compostos carbonila complexamente substituídos aumentam, assim tornando isso indesejável. Por outro lado, em temperaturas maiores que 350°C, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído qualquer permanece em etapa (A), a uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) formada no sistema de etapa (R) decompõe-se, a composição de hidróxi é submetida às reações de desnaturação desidrogenativa, ou decomposição e desnaturação do produto na forma de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído ocorrem facilmente, assim tornando isso indesejável. A partir de tais pontos de vista, a temperatura de reação está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 120 a 320°C e ainda mais

preferivelmente dentro de uma faixa de 140 a 300°C.

Como foi previamente descrito, a reação pela qual O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é formado é uma reação de equilíbrio, e uma vez que a reação é inclinada para o lado de reagentes, a reação é preferivelmente realizada enquanto removendo amônia formada como um subproduto para fora do sistema tanto quanto possível. Amônia é preferivelmente removida de modo que a concentração de amônia no líquido de reação é preferivelmente 1000 ppm ou menos, mais preferivelmente 300 ppm ou menos, ainda mais preferivelmente 100 ppm ou menos e mais preferivelmente 30 ppm ou menos (estando contida no líquido de reação refere-se a estar contida em uma fase líquida quando realizando a etapa (R)). Amônia pode ser removida usando métodos tais como destilação reativa, uso de um gás inerte, separação de membrana e separação adsortiva. Por exemplo, a destilação reativa refere-se a um método para separar amônia continuamente formada durante a reação por destilação na forma de um gás. Isso pode ser realizado enquanto fervendo álcool, um solvente ou composição de hidróxi a fim de aumentar a eficiência de destilação da amônia. Além disso, um método usando um gás inerte refere-se a um método para separar amônia continuamente formada durante a reação a partir do sistema de reação na forma de um gás junto com o gás inerte. Exemplos de gases inertes usados podem incluir nitrogênio, hélio, argônio, dióxido de carbono, metano, etano e propano, estes podem ser usados sozinhos ou como uma mistura, e um método em que o gás inerte é introduzido no sistema de reação é preferível. Exemplos de adsorventes usados em métodos usando separação adsortiva podem incluir adsorventes aptos a serem usados sob as condições de temperatura em que a reação é realizada, tais como sílica, alumina, vários tipos de zeólito ou terra diatomácea. Estes métodos para remover amônia para fora do sistema podem ser realizados sozinhos ou uma pluralidade de tipos pode ser realizada em

combinação.

Um catalisador pode ser usado na reação para o propósito de aumentar a taxa de reação, por exemplo. Exemplos de catalisadores que são usados preferivelmente podem incluir catalisadores básicos tais como metilatos, etilatos ou butiratos (incluindo isômeros) de lítio, sódio, potássio, cálcio ou bário, elementos terrosos raros, antimônio ou bismuto sozinho ou óxidos, sulfetos e sais destes, boro sozinho ou compostos de boro, metais da família de cobre, família de zinco, família de alumínio, família de carbono e família de titânio na tabela periódica bem como óxidos de metal e sulfetos destes, e carbetos e nitretos de elementos da família de carbono excluindo carbono, família de titânio, família de vanádio e família de cromo na tabela periódica. Embora não existam limitações particulares na quantidade de catalisador usada no caso de usar a catalisador, um catalisador pode ser usado dentro da faixa de uma razão estequiométrica de 0,0001 a 100 vezes a dos grupos ureído do composto tendo grupos ureído. Uma vez que existem muitos casos em que é necessário remover o catalisador se um catalisador é adicionado, a reação é preferivelmente realizada sem adicionar um catalisador.

Embora variando de acordo com a composição do sistema de reação, temperatura de reação, método usado para remover amônia, aparelho de reação e semelhantes, a pressão de reação é normalmente dentro de uma faixa de 0,01 Pa a 10 MPa (pressão absoluta), e em consideração de facilidade de aplicação industrial, a pressão de reação está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 0,1 Pa a 5 MPa (pressão absoluta), e em consideração de remover amônia gasosa para fora do sistema, ainda mais preferivelmente de 0,1 Pa a 1,5 MPa (pressão absoluta).

Embora variando de acordo com a composição do sistema de reação, temperatura de reação, método usado para remover amônia, aparelho de reação, pressão de reação e semelhantes, o tempo de reação (tempo de

residência no caso de uma reação contínua) é geralmente de 0,01 a 100 horas. O tempo de reação pode também ser determinado de acordo com a quantidade de formação do composto alvo na forma de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído). Por exemplo, a reação pode ser parada após ter amostrado o líquido de reação, determinado o teor de éster de ácido carbâmico N-substituído no líquido de reação (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído) e confirmar que o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído foi formado em um rendimento de 10% ou mais com base no composto tendo grupos ureído, ou a reação pode ser parada após ter confirmado que o rendimento é 90% ou mais. O líquido de reação contendo o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) é convertido para O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em um processo que contém etapa (P) ser subsequentemente descrito, seguido obtendo um isocianato em etapa (F). Nesta vez, se o teor de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído em etapa (R) é baixo (o rendimento deste é baixo), há casos em que isso pode causar uma diminuição no rendimento de isocianato. Deste modo, o rendimento do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é preferivelmente 50% ou mais, mais preferivelmente 80% ou mais e ainda mais preferivelmente 90% ou mais.

Embora o uso de um solvente de reação não seja necessariamente requerido na reação, um solvente adequado é preferivelmente usado como um solvente de reação para o propósito de facilitar o procedimento de reação, exemplos dos quais incluem alcanos tais como pentano (incluindo isômeros), hexano (incluindo isômeros), heptano (incluindo isômeros), octano (incluindo isômeros), nonano (incluindo isômeros) ou decano (incluindo isômeros); hidrocarbonetos aromáticos e hidrocarbonetos aromáticos substituídos de

alquila tais como benzeno, tolueno, xileno (incluindo isômeros), etil benzeno, diisopropil benzeno (incluindo isômeros), dibutil benzeno (incluindo isômeros) ou naftaleno; compostos nitrila tais como acetonitrila ou benzonitrila; compostos aromáticos substituídos com halogênio ou grupo nitro tais como clorobenzeno, diclorobenzeno (incluindo isômeros), bromobenzeno, dibromobenzeno (incluindo isômeros), cloronaftaleno, bromonaftaleno, nitrobenzeno ou nitronaftaleno; compostos de hidrocarboneto policíclico tais como difenila, difenila substituída, difenil metano, terfenila, antraceno ou dibenzil tolueno (incluindo isômeros); hidrocarbonetos alifáticos tais como ciclo-hexano, ciclopentano, ciclooctano ou etilciclo-hexano; cetonas tais como metil etil cetona ou acetofenona; ésteres tais como ftalato de dibutila, dihexila ftalato, dioctila ftalato ou benzilbutil ftalato; éteres e tioéteres tais como tetrahidrofurano, 1,4-dioxano, 1,2-dimetoxietano, difenil éter ou sulfeto de difenila; compostos cetona tais como acetona ou metil etil cetona; compostos éster tais como acetato de etila ou benzoato de etila; e sulfóxidos tais como dimetilsulfóxido ou difenilsulfóxido. Naturalmente, uma composição de hidróxi usada em excesso na reação é também preferivelmente usada como um solvente de reação.

A reação é realizada em um sistema tendo uma fase gasosa contendo uma composição hidróxi, um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia (um composto que herda um grupo carbonila possuído por uréia, tais como um éster de ácido carbâmico não N-substituído ou biureto, que se refere a um composto excluindo O-ésteres de ácido carbâmico N-substituído) e amônia produzida como um subproduto na reação, e uma fase líquida em que a reação é realizada. Embora a maior parte da reação seja realizada na fase líquida, pode também ser realizada na fase gasosa dependendo das condições de reação. Nesta vez, o conteúdo volumétrico da fase líquida na reação em que a reação é realizada é preferivelmente 50% ou menos. No caso

de realizar a reação continuamente durante um longo período de tempo, embora subprodutos poliméricos possam se formar devido a flutuações em condições de operação (tais como temperatura ou pressão) e semelhantes, se o conteúdo volumétrico da fase líquida no reator é elevado, adesão e acúmulo de tais subprodutos poliméricos no reator podem ser evitados. No entanto, uma vez que a eficiência de remoção de subproduto amônia pode tornar-se pobre e o rendimento do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído) pode diminuir se o conteúdo volumétrico da fase líquida é excessivamente elevado, o conteúdo volumétrico da fase líquida com base na fase gasosa é preferivelmente 50% ou menos, mais preferivelmente 30% ou menos e ainda mais preferivelmente 20% ou menos (o conteúdo volumétrico da fase líquida refere-se à razão volumétrica da fase líquida baseada no volume do tanque de reação no caso de um reator tipo tanque, o volume do estágio menos que o estágio de alimentação (não incluindo o fundo de tanque e refervedor) no caso de um reator tipo coluna, ou o volume do destilador de película fina no caso de a destilador de película fina).

Embora não existam limitações particulares no aparelho de reação usado quando realizando a reação e o reator conhecido pode ser usado, um reator tipo tanque e/ou tipo coluna é usado preferivelmente. O reator usado é preferivelmente equipado com um condensador.

Como foi previamente descrito, a reação é preferivelmente realizada em um sistema tendo uma fase gasosa contendo uma composição hidróxi, um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia e amônia produzida como um subproduto na reação, e uma fase líquida em que a reação é realizada sob condições tal que o conteúdo volumétrico da fase líquida no reator é 50% ou menos, e um reator que atende a estas condições é selecionado para o reator em que a reação é realizada.

Mais especificamente, reatores convencionalmente conhecidos podem ser adequadamente combinados e usados, exemplos dos quais podem incluir um tanque de agitação, um tanque de agitação pressurizado, um tanque de agitação de pressão reduzida, um reator tipo coluna, uma coluna de destilação, uma coluna recheada ou um destilador de película fina.

Não existem limitações particulares no tipo de condensador provido no reator e o condensador conhecido pode ser usado. Por exemplo, convencionalmente condensadores conhecidos tais como um condensador cilíndrico multitubular, um condensador de tubo duplo, um condensador de tubo simples ou um condensador resfriado por ar podem ser adequadamente combinados e usados. O condensador pode ser provido dentro do reator ou provido fora do reator ou pode ser conectado com o reator por uma linha, e vários tipos podem ser empregados em consideração das formas do reator e condensador, a maneira em que o líquido condensado é manuseado e semelhantes. Não existem limitações particulares nos materiais do reator e condensador e materiais conhecidos podem ser usados. Exemplos de materiais que podem ser usados podem incluir vidro, aço inoxidável, aço carbono, Hastelloy, materiais base revestidos com vidro e materiais revestidos com Teflon (marca registrada). Materiais tais como SUS304, SUS316 ou SUS316L são baratos e podem ser usados preferivelmente. Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou um condensador e semelhantes podem ser adicionados como necessário, o método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser usado para aquecer, e o método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriar. Etapas podem também ser adicionadas como necessário. Por exemplo, etapas e aparelhos aptos a serem projetados por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser adicionados, tais como uma etapa de

dissolver a uréia no composto hidróxi aromático, uma etapa de dissolver o composto hidróxi aromático, uma etapa de separar o álcool, uma etapa de separar e/ou purificar o composto hidróxi aromático, uma etapa de purificar o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído a partir do líquido de reação formado ou uma etapa de incinerar ou descartar subprodutos e semelhantes.

Etapa (R) é uma etapa de produzir O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e um álcool em uma fase líquida usando um reator (equipado com um condensador). O componente gasoso formado na etapa (R) contendo um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia e amônia formada como um subproduto na reação é introduzido no condensador provido no reator e toda ou uma porção do álcool e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia são condensados, seguido por recuperação de amônia na forma de um gás.

Nesta vez, o composto tendo grupos carbonila derivados de uréia que está contida em amônia recuperada como um gás a partir do condensador está presente em uma quantidade específica ou menos. Isto é, a razão do número de grupos carbonila (-C(=O)-) contidos no composto tendo grupos carbonila derivados de uréia contida na amônia para o número de amônia moléculas é 1 ou menos, preferivelmente 0,5 ou menos, mais preferivelmente 0,1 ou menos e ainda mais preferivelmente 0,01 ou menos. A razão para fazer a quantidade do composto tendo grupos carbonila derivados de uréia contida na amônia estar dentro de uma faixa específica é evitar adesão e acúmulo de componentes sólidos na linha para transferir amônia a partir do condensador.

Embora todos componentes sólidos que aderem e se acumulam na linha para transferir amônia não possam ser identificados, como um resultado de estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, a maioria foi determinada para ser compostos tendo grupos carbonila. Embora um método possível para evitar a adesão e o acúmulo de tais componentes sólidos inclua o

aquecimento da linha para transferir amônia para decompor compostos tendo grupos carbonila, de acordo com estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, existem muitos casos em que aquecer apenas causa polimerização de produtos de decomposição (tais como ácido isociânico) ou reação dos produtos de decomposição com outros compostos tendo grupos carbonila, assim tornando difícil evitar completamente adesão e acúmulo de componentes sólidos. Além disso, no caso de simplesmente aquecer a linha, foi determinado que compostos tendo grupos carbonila contidos na amônia e seus produtos de decomposição solidificam como um resultado de ser rapidamente resfriados na saída da linha para transferir amônia (tais como a porção em contato com a atmosfera), assim frequentemente resultando em proeminente adesão e acúmulo de componentes sólidos. Como um resultado de conduzir estudos extensivos com relação a este problema, os inventores da presente invenção surpreendentemente verificaram que o problema de adesão e acúmulo de componentes sólidos pode ser resolvido levando a quantidade do composto tendo grupos carbonila derivados de derivado de ácido carbônico contida na amônia ser igual a ou menor que a quantidade específica descrita acima. Embora o mecanismo pelo qual este efeito é demonstrado não seja claro, os inventores da presente invenção supuseram que adesão e acúmulo na linha são causados pelo composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico sozinho, bem como produtos de decomposição e/ou de polimerização do composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico, e que levando a quantidade de grupos carbonila contidos no composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico igual a ou menor que uma concentração específica, adesão do composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico sozinho, bem como as taxas de reação de decomposição e/ou polimerização do composto são abaixadas consideravelmente.

Por outro lado, a composição de hidróxi condensada e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia são feitos para serem tal que a razão estequiométrica da composição de hidróxi condensada para o composto condensado tendo grupos carbonila derivados de uréia é 1 ou mais, preferivelmente 2 ou mais e mais preferivelmente 3 ou mais. A razão para definir tais faixas é possibilitar uma mistura da composição de hidróxi e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia condensados no condensador para estar na forma de uma mistura líquida homogênea. Como um resultado, não apenas é manuseio da mistura mais fácil, mas ocorrência de problemas tais como adesão e acúmulo de componentes sólidos no condensador podem ser evitados.

Ademais, a mistura da composição de hidróxi e do composto tendo grupos carbonila derivados de uréia condensados pelo condensador em etapa (R) pode ser circulada dentro do reator e reutilizada na reação de etapa (A). Nesta vez, a quantidade de amônia contida na mistura é preferivelmente 5000 ppm ou menos, mais preferivelmente 3000 ppm ou menos e ainda mais preferivelmente 2000 ppm ou menos.

Como foi descrito acima, embora vários compostos sejam recuperados na forma de compostos tendo grupos carbonila derivados de uréia, não existem limitações particulares na reutilização de estes compostos.

<Etapa (P)> Etapa de Transesterificação

Embora o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído produzido de acordo com etapa (R) também permite a obtenção de isocianato por decomposição térmica do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, um éster de ácido carbâmico N-substituído mais preferivelmente usado é um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído.

Em geral, O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído são mais suscetíveis a decomposição térmica que O-R^2 ésteres de ácido carbâmico

N-substituído, e são conhecidos para facilmente decompor para o correspondente isocianato e composto hidróxi aromático.

Após converter um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído que pode ser facilmente termicamente decomposto por uma reação de transesterificação acordo com a etapa (P), o resultando O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído pode ser usado em um isocianato reação. Além disso, uma vez que esta etapa é uma etapa de converter o grupo éster do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, é também geralmente referida como uma "etapa de transesterificação" na presente forma de realização.

Etapa (P): uma etapa de obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2)) em uma fase líquida e extraindo álcool formado como um subproduto para uma fase gasosa.

FIG. 4 mostra um desenho conceitual descrevendo a etapa (P).

Além disso, um álcool derivado de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é formado na etapa (P). O seguinte provê uma explicação de etapa (P).

Aqui, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído alvo refere-se a um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representado por uma fórmula mencionada acima (49).

O composto hidróxi aromático na composição de hidróxi aromático reagida pode ser qualquer de um composto hidróxi aromático representado por uma fórmula mencionada acima (2), fórmula (7), fórmula (31), fórmula (32), fórmula (38), fórmula (39) ou fórmula (40). O caso em que um composto hidróxi aromático representado por fórmula (7) ou fórmula (31) está contido é preferível, o caso em que uma composição de hidróxi aromático é

usada que contém um composto hidróxi aromático ativo representado por fórmula (32) é mais preferível, e o caso em que uma composição de hidróxi aromático é usada que contém um composto hidróxi aromático ativo representado por fórmula (38) é ainda mais preferível.

Vários métodos podem ser realizados para a etapa (P) de acordo com os compostos usados e semelhantes com referência a métodos conhecidos (ver, por exemplo, WO 2008/059953).

Embora variando de acordo com os compostos reagidos, as condições de reação de etapa (P) são tais que a quantidade de composto hidróxi aromático na composição de hidróxi aromático usada tem uma razão estequiométrica dentro de uma faixa de 2 a 1000 vezes com base nos grupos éster que compõe o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima. Embora seja preferível usar um excesso do composto hidróxi aromático com base em grupos éster que compõe o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima a fim de completar a reação rapidamente, em consideração do tamanho do reator, a razão estequiométrica está preferivelmente dentro de uma faixa de 2 a 100 vezes e mais preferivelmente dentro de uma faixa de 5 a 50 vezes.

A temperatura de reação está geralmente dentro de uma faixa de 100 a 300°C, e uma temperatura elevada é preferível para aumentar a taxa de reação, mas uma vez que reações laterais podem ocorrer facilmente em elevadas temperaturas, a temperatura de reação está preferivelmente dentro de uma faixa de 150 a 250°C. Um aparelho de resfriamento conhecido ou aparelho de aquecimento pode ser instalado no reator para manter uma temperatura de reação constante. Além disso, embora variando de acordo com os tipos de compostos usados e a temperatura de reação, a reação pode ser realizada em pressão reduzida, pressão normal ou pressão aumentada e geralmente em uma pressão de reação dentro de uma faixa de 20 a 1 x 10^6 Pa. Não existem

limitações particulares no tempo de reação (tempo de residência no caso de um método contínuo), e é geralmente um partir de 0,001 a 100 horas, preferivelmente de 0,01 a 50 horas e mais preferivelmente de 0,1 a 30 horas. Além disso, a reação pode ser terminada após confirmar que a quantidade desejada do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído alvo foi formado amostrando o líquido de reação e determinando a quantidade formada por cromatografia líquida, por exemplo.

Embora um catalisador não seja necessariamente requerido em etapa (P), um catalisador pode ser usado sem problema para abaixar a temperatura de reação ou completar a reação mais rapidamente. O catalisador é usado a 0,01 a 30% em peso e preferivelmente a 0,5 a 20% em peso com base no peso do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído. Exemplos de catalisadores podem incluir Ácidos de Lewis bem como compostos de metal de transição que formam um ácido de Lewis, compostos estanho orgânicos, metais de grupo cobre, compostos de metal de grupo zinco ou ferro, e mais especificamente, ácidos de Lewis e compostos de metal de transição que formam um ácido de Lewis representado por AlX_3, TiX_3, TiX_4, VOX_3, VX_5, ZnX_2, FeX_3 ou SnX_4(em que X representa um halogênio, um grupo acetóxi, um grupo alcóxi ou um grupo ariloxi); compostos de estanho orgânicos representados por $(CH_3)_3SnOCHCH_3$, $(C_2H_5)SnOCOC_6H_5$, $Bu_3SnOCOCH_3$, $Ph_3SnOCOCH_3$, $Bu_2Sn(OCOCH_3)_2$, $Bu_2Sn(OCOC_{11}H_{23})_2$, Ph_3SnOCH_3, $(C_2H_5)_3SnOPh$, $Bu_2Sn(OCH_3)_2$, $Bu_2Sn(OC_2H_5)_2$, $Bu_2Sn(OPh)_2$, $Ph_2Sn(CH_3)_2$, $(C_2H_5)_3SnOH$, PhSnOH, Bu_2SnO, $(C_8H_{17})_2SnO$, Bu_2SnCl_2 ou BuSnO(OH); compostos de metal de família do cobre representados por CuCl, $CuCl_2$, CuBr, $CuBR^2$, CuI, CuI_2, $Cu(OAc)_2$, $Cu(acac)_2$, olefinato de cobre, Bu_2Cu, $(CH_3O)_2Cu$, $AgNO_3$, AgBr, picrato de prata ou $AgC_6H_6ClO_4$; compostos de zinco representado por $Zn(acac)_2$; e, compostos de metal de família do ferro representado por $Fe(C_{10}H_8)(CO)_5$, $Fe(CO)_5$, $Fe(C_4H_6)(CO)_3$,

$Co(mesitileno)_2(PEt_2Ph_2)$, $CoC_5F_5(CO)_7$ ou ferroceno. (Na listagem acima de exemplos, Bu refere-se a um grupo butila, Ph refere-se a um grupo fenila, e acac refere-se a um ligante de acetil acetona quelato.) Aminas tais como 1,4-diazabiciclo[2,2,2]octano, trietilenodiamina ou trietilamina são adequadas para uso como catalisadores, enquanto catalisadores de metal orgânico tais como dilaurato de dibutil estanho, octoato de chumbo ou octoato estanhoso são particularmente preferíveis. Estes compostos podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como a mistura.

Embora o uso de um solvente de reação não seja necessariamente requerido na presente forma de realização, um solvente adequado inerte pode ser preferivelmente usado como um solvente de reação para o propósito de facilitar o procedimento de reação e semelhantes, exemplos dos quais podem incluir alcanos tais como hexano (incluindo isômeros), heptano (incluindo isômeros), octano (incluindo isômeros), nonano (incluindo isômeros) ou decano (incluindo isômeros); hidrocarbonetos aromáticos e hidrocarbonetos aromáticos substituídos de alquila tais como benzeno, tolueno, xileno (incluindo isômeros), etil benzeno, diisopropil benzeno (incluindo isômeros), dibutil benzeno (incluindo isômeros) ou naftaleno; compostos aromáticos substituídos com um grupo halogênio ou nitro tais como clorobenzeno, diclorobenzeno (incluindo isômeros), bromobenzeno, dibromobenzeno (incluindo isômeros), cloronaftaleno, bromonaftaleno, nitrobenzeno ou nitronaftaleno; compostos de hidrocarboneto policíclico tais como difenila, difenila substituída, difenil metano, terfenila, antraceno ou dibenzil tolueno (incluindo isômeros); hidrocarbonetos alifáticos tais como ciclo-hexano, ciclopentano, ciclooctano ou etilciclo-hexano; cetonas tais como metil etil cetona ou acetofenona; ésteres tais como ftalato de dibutila, dihexila ftalato, dioctila ftalato ou benzilbutil ftalato; éteres e tioéteres tais como difenil éter ou sulfeto de difenila; sulfóxidos tais como dimetilsulfóxido ou difenilsulfóxido; e

óleo de silicone. Estes solventes podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como uma mistura.

A reação de transesterificação na presente forma de realização é uma reação de equilíbrio. Deste modo, é preferível permitir a reação prosseguir enquanto removendo o produto na forma de álcool (álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima) a partir do sistema de reação a fim de efetuar transesterificação eficientemente. Deste modo, se o composto hidróxi aromático é selecionado tal que o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático usado em transesterificação é maior que o ponto de ebulição padrão do álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima, o composto tendo o menor ponto de ebulição padrão no sistema de reação torna o álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima, assim facilitando remoção de produtos a partir do sistema de reação. Baseado na descoberta que normalmente separação destilativa industrialmente adequada é possível se os pontos de ebulição padrão de dois componentes a serem separados são 10°C ou maior, um composto hidróxi aromático é preferivelmente usado tal que o ponto de ebulição padrão do composto tendo o menor ponto de ebulição padrão na composição de hidróxi aromático (com base em uma comparação de pontos de ebulição padrão) é 10°C ou maior que o ponto de ebulição padrão do álcool.

Além disso, transesterificação é preferivelmente realizada pelo método contínuo para permitir transesterificação prosseguir eficientemente. Isto é, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima e a composição de hidróxi aromático são continuamente fornecidas a um reator, transesterificação é realizada, álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima que é formado é extraído a partir do reator na forma de um componente gasoso, e um líquido de reação contendo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído formado e a composição de hidróxi

aromático é continuamente extraída a partir do fundo do reator.

Embora o material do reator e linhas usadas para efetuar transesterificação possa ser dos materiais conhecidos providos eles não têm um efeito prejudicial nas substâncias iniciais e reagentes, materiais tais como SUS304, SUS316 ou SUS316L são baratos e podem ser usados preferivelmente. Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou um condensador e semelhantes podem ser adicionados como necessário, o método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser usado para aquecer, e o método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriar. Etapas podem também ser adicionadas como necessário. Por exemplo, etapas e aparelhos aptos a serem concebidas por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser adicionados, tais como uma etapa de dissolver o composto hidróxi aromático, uma etapa de separar o álcool, uma etapa de separar e/ou purificar o composto hidróxi aromático, uma etapa de purificar o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir do líquido de reação formado ou uma etapa de incinerar ou descartar subprodutos e semelhantes.

Não existem limitações particulares no tipo de reator, e um reator de tipo de tanque ou um tipo de coluna conhecido pode ser usado. Vários métodos conhecidos são usados para tal reator, exemplos dos quais podem incluir tipo usando reatores contendo um tanque de agitação, um tanque de agitação de estágios múltiplos, uma coluna de destilação, uma coluna de destilação de estágios múltiplos, um reator multitubular, uma coluna de destilação de estágios múltiplos contínua, uma coluna recheada, um evaporador de película fina, um reator provido com suporte dentro, um reator de circulação forçada, um evaporador de película descendente, um evaporador de queda descendente, um reator de fluxo de gotejamento ou uma coluna de

borbulhamento, e usando combinações dos mesmos. Métodos usando um evaporador de película fina ou um reator de tipo coluna são preferíveis do ponto de vista de eficientemente deslocar o equilíbrio para o lado dos produtos, enquanto uma estrutura tendo uma área de contato de gás-líquido grande é preferível para estar apto a rapidamente transferir o álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima formado para a fase gasosa.

Uma coluna de destilação de estágios múltiplos refere-se a uma coluna de destilação tendo estágios múltiplos em que o número de placas teóricas de destilação é 2 ou mais, e qualquer coluna de destilação de estágios múltiplos pode ser utilizada desde que permita destilação contínua. Qualquer coluna de destilação de estágios múltiplos pode ser usada para a coluna de destilação de estágios múltiplos desde que seja comumente usada como uma coluna de destilação de estágios múltiplos, exemplos dos quais podem incluir tipo coluna de bandeja usando uma bandeja tal como uma bandeja de borbulhamento, uma bandeja de placa porosa, uma bandeja de válvula ou uma bandeja contra corrente, e coluna recheada tipo recheada com vários tipos de materiais de recheio tais como um anel de raschig, um anel de lessing, um anel de polo, sela de Berl, sela intertrava, recheio de Dixon, recheio de McMahon, Helipack, recheio de Sulzer ou Mellapak. Qualquer coluna recheada pode ser usada desde que a coluna seja recheada com um material de recheio conhecido como descrito acima. Ademais, uma combinação de tipo bandeja-coluna recheada é também usada preferivelmente que combina uma porção de bandeja com uma porção recheada com um material de recheio.

Uma linha para alimentar gás inerte e/ou solvente inerte líquido a partir da menor porção do reator pode ser separadamente fixada, e no caso em que a mistura do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído alvo e do composto hidróxi aromático contém O-R^2 éster de ácido carbâmico

N-substituído de matéria prima, uma linha pode ser fixada para circular novamente toda ou uma porção da mistura para o reator. Além disso, no caso de usar o solvente inerte mencionado acima, o solvente inerte pode estar na forma de um gás e/ou um líquido.

O componente gasoso extraído a partir do reator contendo álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima é preferivelmente purificado usando um método conhecido tais como eles que usa uma coluna de destilação, e pode ser reutilizado como um álcool de etapa (A) e/ou etapa (R).

<Via 4)>

Via 4) é um método para realizar etapa (R) seguido por realização da etapa (P) e etapa (C). Via 4) é um aspecto do método indicado em via 2).

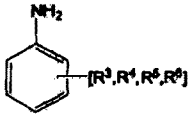
O método de via 4) é um método para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-), a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (P) realizando uma etapa (C) seguinte após etapa (P), em que a amina primária orgânica usada em etapa (A) é uma monoamina primária orgânica aromática representada pela seguinte fórmula (5). Um composto mono-hidróxi aromático é preferivelmente usado para o composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático usada em etapa (A) e/ou etapa (R) e/ou etapa (P).

Etapa (C): uma etapa de obter O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-), reagindo o O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com formaldeído ou um agente de reticulação metilenante e grupos aromáticos de reticulação derivados da monoamina primária orgânica aromática contida no

O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com os grupos metileno (-CH_2-).

O O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído desta via 4) refere-se a O-R2 éster de ácido carbâmico N-substituído não reagido em etapa (P).

Nesta via, etapa (A) é realizada usando uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula para a amina primária orgânica para obter um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) derivado da amina primária orgânica, seguido por realização da etapa (R) para obter um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído, realizando etapa (P) para obter um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído, e finalmente realizando etapa (C). Isto é, a amina primária orgânica usada nesta via é uma amina primária orgânica representada por fórmula (5), o composto tendo grupos ureído obtidos em etapa (A) desta via é um composto tendo grupos ureído representados por fórmula (41) derivados da amina primária orgânica, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) desta via é um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído em que r=1 que é representado por fórmula (49) e derivado dos grupos ureído e um álcool, e mais especificamente um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (146), e o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (P) desta via é um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em que q=1 que é representado por fórmula (43) e derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático, e mais especificamente um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (149). Indicações de exemplos específicos de cada destes compostos estão respectivamente contidas em explicações prévias dos mesmos.

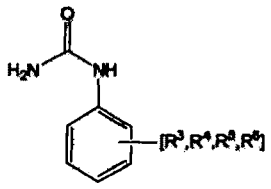


(5)

(em que,

pelo menos um local na posição orto e/ou posição para do grupo NH_2 de uma monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) não é substituída, grupos R^3 a R^6 respectivamente representam um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel, grupos R^3 a R^6 podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^3 a R^6 podem juntos ligar-se para formar um anel com um anel aromático, grupos R^3 a R^6 são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre grupos compostos de grupos em que um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono de grupos R^3 a R^6 é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e o número total de átomos de carbono que compõe a monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) é um inteiro de 6 a 13).

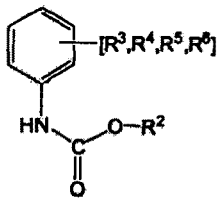
Neste caso, o composto tendo grupos ureído obtidos em etapa (A) é pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído representado pela seguinte fórmula (148). Além disso, os grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 na seguinte fórmula (148) são selecionados a partir dos grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 de uma amina primária orgânica representada por uma fórmula mencionada acima (5), e é um composto em que grupos amino (-grupos NH_2) da amina primária orgânica representada por fórmula (5) são na forma de grupos ureído (-NH-CO-NH_2):



(148)

(em que

pelo menos um local na posição orto e/ou posição para do grupo ureído de uma monouréia orgânica aromática N-substituída representado por fórmula (148) não é substituída, grupos R^3 a R^6 respectivamente representam um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel, grupos R^3 a R^6 podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^3 a R^6 podem juntos ligar-se para formar um anel com um anel aromático, grupos R^3 a R^6 são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre grupos compostos de grupos em que um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono de grupos R^3 a R^6 é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e o número total de átomos de carbono que compõe a monouréia orgânica aromática N-substituída representado por fórmula (148), excluindo grupos ureído (-NH-CO-NH_2), é um inteiro de 6 a 13).



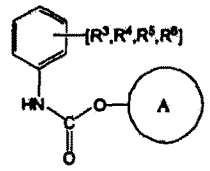
(146)

(em que

grupos R^2 a R^6 são os grupos indicados acima).

Neste caso, o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido

em etapa (P) realizando etapa (R) é pelo menos um tipo de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (149). Além disso, os grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 na seguinte fórmula (149) são selecionados a partir dos grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 de uma amina primária orgânica representada por uma fórmula mencionada acima (5), e é um composto em que grupos ureído (-NH-CO-NH_2) de um composto tendo grupos ureído representados por fórmula (148) são na forma de grupos O-aril éster de ácido carbâmico:



(149)

(em que

grupos R^3 a R^6 são os grupos indicados acima).

Em etapas (A), (R) e (P) desta via, a amina primária orgânica usada é uma amina primária orgânica representada por fórmula (5), e etapas (A), (R) e (P) desta via são realizadas sob as condições de etapas (A), (R) e (P) de via 3).

Embora variando de acordo com os compostos reagidos, as condições de reação para produzir O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e um álcool de etapa (R) são tais que a quantidade de álcool usada tem uma razão estequiométrica dentro de uma faixa de 1 a 500 vezes baseada nos grupos ureído do composto tendo grupos ureído usados. Embora seja preferível usar um excesso de álcool uma vez que compostos carbonila complexamente substituídos e compostos de peso molecular elevados tendo ligações carbonila em moléculas destes formam facilmente se a razão estequiométrica é menor que 1 vez, em consideração do tamanho do reator, a razão estequiométrica está preferivelmente dentro de uma faixa de 1 a 200 vezes, mais preferivelmente dentro de uma faixa de 1,5 a 100

vezes e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa de 2 a 50 vezes.

Embora variando de acordo com os compostos usados, a temperatura de reação está preferivelmente dentro de uma faixa de 100 a 350°C. se a temperatura é menor que 100°C, a reação fica lenta ou a reação dificilmente prossegue de qualquer modo, ou compostos carbonila complexamente substituídos aumentam, assim tornando isso indesejável. Por outro lado, em temperaturas maiores que 350°C, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído tampouco permanece em etapa (A), a uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) formada no sistema de etapa (R) decompõe, a composição de hidróxi é submetida a reações de desnaturação desidrogenativa, ou decomposição e desnaturação do produto na forma de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído ocorrem facilmente, assim tornando isso indesejável. A partir de tais pontos de vista, a temperatura de reação está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 120 a 320°C e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa de 140 a 300°C.

Como foi previamente descrito, a reação pela qual O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é formado é uma reação de equilíbrio, e uma vez que a reação é inclinada para o lado de reagentes, a reação é preferivelmente realizada enquanto removendo amônia formada como um subproduto para fora do sistema tanto quanto possível. Amônia é preferivelmente removida de modo que a concentração de amônia no líquido de reação é preferivelmente 1000 ppm ou menos, mais preferivelmente 300 ppm ou menos, ainda mais preferivelmente 100 ppm ou menos e mais preferivelmente 30 ppm ou menos (estando contida no líquido de reação refere-se a estar contida em uma fase líquida quando realizando a etapa (R)). Amônia pode ser removida usando métodos tais como destilação reativa, uso de um gás inerte, separação de membrana e separação adsortiva. Por exemplo, a destilação reativa refere-se a um método para separar amônia continuamente

formada durante a reação por destilação na forma de um gás. Isso pode ser realizado enquanto fervendo álcool, um composto hidróxi aromático, solvente ou composição de hidróxi a fim de aumentar a eficiência de destilação da amônia. Além disso, um método usando um gás inerte refere-se a um método para separar amônia continuamente formada durante a reação a partir do sistema de reação na forma de um gás junto com o gás inerte. Exemplos de gases inertes usados podem incluir nitrogênio, hélio, argônio, dióxido de carbono, metano, etano e propano, estes podem ser usados sozinhos ou como uma mistura, e um método em que o gás inerte é introduzido no sistema de reação é preferível. Exemplos de adsorventes usados em métodos usando separação adsortiva podem incluir adsorventes aptos a serem usados sob as condições de temperatura em que a reação é realizada, tais como sílica, alumina, vários tipos de zeólito ou terra diatomácea. Estes métodos para remover amônia para fora do sistema podem ser realizados sozinhos ou uma pluralidade de tipos pode ser realizada em combinação.

Um catalisador pode ser usado na reação para o propósito de aumentar a taxa de reação, por exemplo. Exemplos de catalisadores que são usados preferivelmente podem incluir catalisadores básicos tais como metilatos, etilatos ou butiratos (incluindo isômeros) de lítio, sódio, potássio, cálcio ou bário, elementos terrosos raros, antimônio ou bismuto sozinho ou óxidos, sulfetos e sais destes, boro sozinho ou compostos de boro, metais da família de cobre, família de zinco, família de alumínio, família de carbono e família de titânio na tabela periódica bem como óxidos de metal e sulfetos destes, e carbetos e nitretos de elementos da família de carbono excluindo carbono, família de titânio, família de vanádio e família de cromo na tabela periódica. Embora não existam limitações particulares na quantidade de catalisador usada no caso de usar um catalisador, um catalisador pode ser usado dentro da faixa de uma razão estequiométrica de 0,0001 a 100 vezes os grupos ureído do

composto tendo grupos ureído.

Embora variando de acordo com a composição do sistema de reação, temperatura de reação, método usado para remover amônia, aparelho de reação e semelhantes, a pressão de reação está geralmente dentro de uma faixa de preferivelmente de 0,01 Pa a 10 MPa (pressão absoluta), e em consideração de facilidade de aplicação industrial, a pressão de reação está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 0,1 Pa a 5 MPa (pressão absoluta), e em consideração de remover amônia gasosa para fora do sistema, ainda mais preferivelmente de 0,1 Pa a 1,5 MPa (pressão absoluta).

Embora variando de acordo com a composição do sistema de reação, temperatura de reação, método usado para remover amônia, aparelho de reação, pressão de reação e semelhantes, o tempo de reação (tempo de residência no caso de uma reação contínua) é geralmente de 0,01 a 100 horas. O tempo de reação pode também ser determinado de acordo com a quantidade de formação do composto alvo na forma de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído). Por exemplo, a reação pode ser parada após ter amostrado o líquido de reação, determinado o teor de éster de ácido carbâmico N-substituído no líquido de reação (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído) e confirmar que o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído foi formado em um rendimento de 10% ou mais com base no composto tendo grupos ureído, ou a reação pode ser parada após ter confirmado que o rendimento é 90% ou mais. O líquido de reação contendo o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) é convertido para O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em um processo que contém etapa (P) a ser subsequentemente descrito, seguido obtendo um isocianato em etapa (F). Nesta vez, se o teor de

O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído em etapa (R) é baixo (o rendimento deste é baixo), há casos em que isso pode causar uma diminuição no rendimento de isocianato. Deste modo, o rendimento do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é preferivelmente 50% ou mais, mais preferivelmente 80% ou mais e ainda mais preferivelmente 90% ou mais.

Embora o uso de um solvente de reação não seja necessariamente requerido na reação, um solvente adequado é preferivelmente usado como um solvente de reação para o propósito de facilitar o procedimento de reação, exemplos dos quais podem incluir alcanos tais como pentano (incluindo isômeros), hexano (incluindo isômeros), heptano (incluindo isômeros), octano (incluindo isômeros), nonano (incluindo isômeros) ou decano (incluindo isômeros); hidrocarbonetos aromáticos e hidrocarbonetos aromáticos substituídos de alquila tais como benzeno, tolueno, xileno (incluindo isômeros), etil benzeno, diisopropil benzeno (incluindo isômeros), dibutil benzeno (incluindo isômeros) ou naftaleno; compostos nitrila tais como acetonitrila ou benzonitrila; composto aromáticos substituídos com um grupo halogênio ou nitro tais como clorobenzeno, diclorobenzeno (incluindo isômeros), bromobenzeno, dibromobenzeno (incluindo isômeros), cloronaftaleno, bromonaftaleno, nitrobenzeno ou nitronaftaleno; compostos de hidrocarboneto policíclico tais como difenila, difenila substituída, difenil metano, terfenila, antraceno ou dibenzil tolueno (incluindo isômeros); hidrocarbonetos alifáticos tais como ciclo-hexano, ciclopentano, ciclooctano ou etilciclo-hexano; cetonas tais como metil etil cetona ou acetofenona; ésteres tais como ftalato de dibutila, dihexila ftalato, ftalato de dioctila ou ftalato de benzilbutila; éteres e tioéteres tais como tetrahidrofurano, 1,4-dioxano, 1,2-dimetoxietano, difenil éter ou sulfeto de difenila; compostos cetona tais como acetona ou metil etil cetona; compostos éster tais como acetato de etila ou benzoato de etila; e sulfóxidos tais como dimetilsulfóxido ou difenilsulfóxido. Naturalmente, uma composição

de hidróxi usada em excesso na reação é também preferivelmente usada como um solvente de reação.

A reação é realizada em um sistema tendo uma fase gasosa contendo uma composição hidróxi, um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia (um composto que herda um grupo carbonila possuído por uréia, tais como um éster de ácido carbâmico não N-substituído ou biureto, que se refere a um composto excluindo O-ésteres de ácido carbâmico N-substituído) e amônia produzida como um subproduto na reação, e uma fase líquida em que a reação é realizada. Embora a maior parte da reação é realizada na fase líquida, pode também ser realizada na fase gasosa dependendo das condições de reação. Nesta vez, o conteúdo volumétrico da fase líquida na reação em que a reação é realizada é preferivelmente 50% ou menos. No caso de realizar a reação continuamente durante um longo período de tempo, embora subprodutos poliméricos possam formar devido a flutuações em condições de operação (tais como temperatura ou pressão) e semelhantes, se o conteúdo volumétrico da fase líquida no reator é elevado, adesão e acúmulo de tais subprodutos poliméricos no reator podem ser evitados. No entanto, uma vez que a eficiência de remoção de subproduto amônia pode tornar-se pobre e o rendimento do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído) pode diminuir se o conteúdo volumétrico da fase líquida é excessivamente elevado, o conteúdo volumétrico da fase líquida com base na fase gasosa é preferivelmente 50% ou menos, mais preferivelmente 30% ou menos e ainda mais preferivelmente 20% ou menos (o conteúdo volumétrico da fase líquida refere-se a razão volumétrica da fase líquida baseada no volume da tanque de reação no caso de um reator tipo tanque, o volume do estágio menos que o estágio de alimentação (não incluindo o fundo de tanque e refervedor) no caso de um reator tipo coluna, ou o volume

do destilador de película fina no caso de um destilador de película fina).

Embora não existam limitações particulares no aparelho de reação usado quando realizando a reação e um reator conhecido pode ser usado, um reator tipo tanque e/ou tipo coluna é usado preferivelmente. O reator usado é preferivelmente equipado com um condensador.

Como foi previamente descrito, a reação é preferivelmente realizada em um sistema contendo uma fase gasosa contendo uma composição hidróxi, um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia e amônia produzida como um subproduto na reação, e uma fase líquida em que a reação é realizada, e sob condições tal que o conteúdo volumétrico da fase líquida no reator em que a reação é realizada é 50% ou menos, e um reator que atende a estas condições é selecionado para o reator em que a reação é realizada.

Mais especificamente, reatores convencionalmente conhecidos podem ser adequadamente combinados e usados, exemplos dos quais podem incluir um tanque de agitação, um tanque de agitação pressurizado, um tanque de agitação despressurizado, um reator tipo coluna, uma coluna de destilação, uma coluna recheada ou um destilador de película fina.

Não existem limitações particulares no tipo de condensador provido no reator e o condensador conhecido pode ser usado. Por exemplo, convencionalmente condensadores conhecidos tais como a condensador cilíndrico multitubular, um condensador de tubo duplo, um condensador de tubo simples ou um condensador resfriado por ar podem ser adequadamente combinados e usados. O condensador pode ser provido dentro do reator ou fora do reator, ou pode ser conectado com o reator por uma linha, e vários tipos podem ser empregados em consideração das formas do reator e condensador, a maneira em que o líquido condensado é manuseado e semelhantes.

Não existem limitações particulares nos materiais do reator e condensador e materiais conhecidos podem ser usados. Exemplos de materiais

que podem ser usados podem incluir vidro, aço inoxidável, aço carbono, Hastelloy, materiais base revestidos com vidro e materiais revestidos com Teflon (marca registrada). Materiais tais como SUS304, SUS316 ou SUS316L são baratos e pode ser usado preferivelmente. Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou um condensador e semelhantes podem ser adicionados como necessário, o método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser usado para aquecer, e o método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriar. Etapas podem também ser adicionadas como necessário. Por exemplo, etapas e aparelhos aptos a serem projetados por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser adicionados, tais como uma etapa de dissolver o composto tendo grupos ureído na composição de hidróxi aromático, uma etapa de dissolver o composto hidróxi aromático, uma etapa de separar álcool, uma etapa de separar e/ou purificar o composto hidróxi aromático, uma etapa de purificar O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído a partir do líquido de reação formado, ou uma etapa de incinerar ou descartar subprodutos e semelhantes.

Etapa (R) é uma etapa de produzir O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo (esterificando) um composto tendo grupos ureído e um álcool em uma fase líquida usando um reator (equipado com um condensador). O componente gasoso formado na etapa (R) contendo um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia e amônia formada como um subproduto na reação é introduzido no condensador provido no reator e todo ou uma porção do álcool e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia são condensados seguidos por recuperação de amônia na forma de um gás.

Nesta vez, o composto tendo grupos carbonila derivados de uréia que está contido em amônia recuperada como um gás a partir do condensador

está presente em uma quantidade específica ou menos. Isto é, a razão do número de grupos carbonila (-C(=O)-) contidos no composto tendo grupos carbonila derivados de uréia contida na amônia para o número de amônia moléculas é 1 ou menos, preferivelmente 0,5 ou menos, mais preferivelmente 0,1 ou menos e ainda mais preferivelmente 0,01 ou menos. A razão para fazer a quantidade do composto tendo grupos carbonila derivados de uréia contida na amônia estar dentro de uma faixa específica é evitar adesão e acúmulo de componentes sólidos na linha para transferir amônia a partir do condensador.

Embora todos os componentes sólidos que aderem e se acumulam na linha para transferir amônia não possam ser identificados, como um resultado de estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, a maioria foi determinada para ser compostos tendo grupos carbonila. Embora um método possível para evitar a adesão e o acúmulo de tais componentes sólidos inclua aquecer uma linha para transferir amônia para decompor compostos tendo grupos carbonila, de acordo com estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, existem muitos casos em que aquecer apenas causa polimerização de produtos de decomposição (tais como ácido isociânico) ou reação com outros compostos tendo grupos carbonila, assim tornando difícil evitar completamente adesão e acúmulo de componentes sólidos. Além disso, no caso de simplesmente aquecer a linha, foi determinado que compostos tendo grupos carbonila contidos na amônia e seus produtos de decomposição solidificam como um resultado de ser rapidamente resfriados na saída da linha para transferir amônia (tais como a porção em contato com a atmosfera), assim frequentemente resultando em proeminente adesão e acúmulo de componentes sólidos. Como um resultado de conduzir estudos extensivos com relação a este problema, os inventores da presente invenção verificaram que o problema de adesão e acúmulo de componentes sólidos pode ser resolvido levando a quantidade do composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido

carbônico contida na amônia ser igual a ou menor que a quantidade específica descrita acima. Embora o mecanismo pelo qual este efeito seja demonstrado não seja claro, os inventores da presente invenção supuseram que adesão e acúmulo na linha são causados pelo composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico sozinho, bem como produtos de decomposição e/ou de polimerização do composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico, e que levando a quantidade de grupos carbonila contidos no composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico igual a ou menor que a concentração específica, adesão do composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico sozinho, bem como as taxas de reação de decomposição e/ou polimerização do composto são abaixadas consideravelmente.

Por outro lado, a composição de hidróxi condensada e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia são feitos para serem tal que a razão estequiométrica de a composição de hidróxi condensada para o composto condensado tendo grupos carbonila derivados de uréia é 1 ou mais, preferivelmente 2 ou mais e mais preferivelmente 3 ou mais. A razão para definir tais faixas é possibilitar uma mistura da composição de hidróxi e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia condensados no condensador para estar na forma de um mistura líquida homogênea. Como um resultado, não apenas é manuseio da mistura mais fácil, mas ocorrência de problemas tais como adesão e acúmulo de componentes sólidos no condensador podem ser evitados.

Ademais, a mistura da composição de hidróxi e do composto tendo grupos carbonila derivados de uréia condensados pelo condensador em etapa (R) pode ser circulada dentro do reator e reutilizada na reação de etapa (A). Nesta vez, a quantidade de amônia contida na mistura é preferivelmente 5000 ppm ou menos, mais preferivelmente 3000 ppm ou menos e ainda mais

preferivelmente 2000 ppm ou menos.

Como foi descrito acima, embora vários compostos sejam recuperados na forma de compostos tendo grupos carbonila derivados de uréia, não existam limitações particulares na reutilização de estes compostos.

<Etapa (P)>

Etapa de esterificação

Uma vez que esta etapa é uma etapa de converter o grupo éster de um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, é também geralmente referida como uma "etapa de esterificação" na presente forma de realização.

FIG. 5 mostra um desenho conceitual descrevendo a etapa (P).

Além disso, um álcool derivado de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é formado nesta etapa (P). O seguinte provê uma explicação da etapa (P).

O composto hidróxi aromático na composição de hidróxi aromático reagida pode ser qualquer de um composto hidróxi aromático representado por uma fórmula mencionada acima (2), fórmula (7), fórmula (31), fórmula (32), fórmula (38), fórmula (39) ou fórmula (40). O caso em que um composto hidróxi aromático representado por fórmula (7) ou fórmula (31) está contido é preferível, o caso em que uma composição de hidróxi aromático é usada que contém um composto hidróxi aromático ativo representado por fórmula (32) é mais preferível, e o caso em que uma composição de hidróxi aromático é usada que contém um composto hidróxi aromático ativo representado por fórmula (38) é ainda mais preferível.

Vários métodos podem ser realizados para a etapa (P) de acordo com os compostos usados e semelhantes com referência a métodos conhecidos (ver, por exemplo, WO 2008/059953).

Embora variando de acordo com os compostos reagidos, as condições de reação de etapa (P) são tais que a quantidade de composto hidróxi

aromático na composição de hidróxi aromático usada tem uma razão estequiométrica dentro de uma faixa de 2 a 1000 vezes baseada nos grupos éster que compõe o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima. Embora seja preferível usar um excesso do composto hidróxi aromático com base em grupos éster que compõe o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima a fim de completar a reação rapidamente, em consideração do tamanho do reator, a razão estequiométrica está preferivelmente dentro de uma faixa de 2 a 100 vezes e mais preferivelmente dentro de uma faixa de 5 a 50 vezes.

A temperatura de reação está geralmente dentro de uma faixa de 100 a 300°C, e uma temperatura elevada é preferível para aumentar a taxa de reação, mas uma vez que reações laterais podem ocorrer facilmente em elevadas temperaturas, a temperatura de reação está preferivelmente dentro de uma faixa de 150 a 250°C. Um aparelho de resfriamento conhecido ou aparelho de aquecimento pode ser instalado no reator para manter uma temperatura de reação constante. Além disso, embora variando de acordo com os tipos de compostos usados e a temperatura de reação, a reação pode ser realizada em pressão reduzida, pressão normal ou pressão aumentada e normalmente em uma pressão de reação dentro de uma faixa de 20 a 1 x 10^6 Pa. Não existem limitações particulares no tempo de reação (tempo de residência no caso de um método contínuo), e é geralmente de 0,001 a 100 horas, preferivelmente de 0,01 a 50 horas e mais preferivelmente de 0,1 a 30 horas. Além disso, a reação pode ser terminada após confirmar que uma quantidade desejada do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído alvo foi formada amostrando o líquido de reação e determinando a quantidade formada por cromatografia líquida, por exemplo.

Embora um catalisador não seja necessariamente requerido em etapa (P), um catalisador pode ser usado sem problema para abaixar a

temperatura de reação ou completar a reação mais rapidamente. O catalisador é usado a 0,01 a 30% em peso e preferivelmente a 0,5 a 20% em peso com base no peso do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído. Exemplos de catalisadores podem incluir Ácidos de Lewis bem como compostos de metal de transição que formam um ácido de Lewis, compostos estanho orgânicos, metais de grupo cobre, compostos de metal de grupo zinco ou ferro, e mais especificamente, ácidos de Lewis e compostos de metal de transição que formam um ácido de Lewis representado por AlX_3, TiX_3, TiX_4, VOX_3, VX_5, ZnX_2, FeX_3 ou SnX_4(em que X representa um halogênio, um grupo acetóxi, um grupo alcóxi ou um grupo ariloxi); compostos de estanho orgânicos representados por $(CH_3)_3SnOCHCH_3$, $(C_2H_5)SnOCOC_6H_5$, $Bu_3SnOCOCH_3$, $Ph_3SnOCOCH_3$, $Bu_2Sn(OCOCH_3)_2$, $Bu_2Sn(OCOC_{11}H_{23})_2$, Ph_3SnOCH_3, $(C_2H_5)_3SnOPh$, $Bu_2Sn(OCH_3)_2$, $Bu_2Sn(OC_2H_5)_2$, $Bu_2Sn(OPh)_2$, $Ph_2Sn(CH_3)_2$, $(C_2H_5)_3SnOH$, PhSnOH, Bu_2SnO, $(C_8H_{17})_2SnO$, Bu_2SnCl_2 ou BuSnO(OH); compostos de metal de família do cobre representado por CuCl, $CuCl_2$, CuBr, $CuBR^2$, CuI, CuI_2, $Cu(OAc)_2$, $Cu(acac)_2$, olefinato de cobre, Bu_2Cu, $(CH_3O)_2Cu$, $AgNO_3$, AgBr, picrato de prata ou $AgC_6H_6ClO_4$; compostos de zinco representado por $Zn(acac)_2$; e, compostos de metal de família do ferro representado por $Fe(C_{10}H_8)(CO)_5$, $Fe(CO)_5$, $Fe(C_4H_6)(CO)_3$, $Co(mesitileno)_2(PEt_2Ph_2)$, $CoC_5F_5(CO)_7$ ou ferroceno. (Na listagem acima de exemplos, Bu refere-se a um grupo butila, Ph refere-se a um grupo fenila, e acac refere-se a um ligante de acetil acetona quelato.) Aminas tais como 4-diazabiciclo[2,2,2]octano, trietilenodiamina ou trietilamina são adequados para uso como catalisadores, enquanto catalisadores de metal orgânico tais como dilaurato de dibutil estanho, octoato de chumbo ou octoato estanhoso são particularmente preferíveis. Estes compostos podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como a mistura.

Embora o uso de um solvente de reação não seja necessariamente

requerido na presente forma de realização, um solvente adequado inerte pode ser preferivelmente usado como um solvente de reação para o propósito de facilitar o procedimento de reação e semelhantes, exemplos dos quais podem incluir alcanos tais como hexano (incluindo isômeros), heptano (incluindo isômeros), octano (incluindo isômeros), nonano (incluindo isômeros) ou decano (incluindo isômeros); hidrocarbonetos aromáticos e hidrocarbonetos aromáticos substituídos de alquila tais como benzeno, tolueno, xileno (incluindo isômeros), etil benzeno, diisopropil benzeno (incluindo isômeros), dibutil benzeno (incluindo isômeros) ou naftaleno; compostos aromáticos substituídos com um grupo halogênio ou nitro tais como clorobenzeno, diclorobenzeno (incluindo isômeros), bromobenzeno, dibromobenzeno (incluindo isômeros), cloronaftaleno, bromonaftaleno, nitrobenzeno ou nitronaftaleno; compostos de hidrocarboneto policíclico tais como difenila, difenila substituída, difenil metano, terfenila, antraceno ou dibenzil tolueno (incluindo isômeros); hidrocarbonetos alifáticos tais como ciclo-hexano, ciclopentano, ciclooctano ou etilciclo-hexano; cetonas tais como metil etil cetona ou acetofenona; ésteres tais como ftalato de dibutila, dihexila ftalato, ftalato de dioctila ou ftalato de benzilbutila; éteres e tioéteres tais como difenil éter ou sulfeto de difenila; sulfóxidos tais como dimetilsulfóxido ou difenilsulfóxido; e óleo de silicone. Estes solventes podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como uma mistura.

A reação de transesterificação na presente forma de realização é uma reação de equilíbrio. Deste modo, é preferível permitir a reação prosseguir enquanto removendo o produto na forma de álcool (álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima) a partir do sistema de reação a fim de efetuar transesterificação eficientemente. Deste modo, se o composto hidróxi aromático é selecionado tal que o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático usado em transesterificação é maior que o

ponto de ebulição padrão do álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima, o composto tendo o menor ponto de ebulição padrão no sistema de reação torna o álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima, assim facilitando remoção de produtos a partir do sistema de reação. Com base na descoberta que normalmente separação destilativa industrialmente adequada é possível se os pontos de ebulição padrão de dois componentes a serem separados são 10°C ou maior, um composto hidróxi aromático é preferivelmente usado tal que o ponto de ebulição padrão do composto tendo o menor ponto de ebulição padrão na composição de hidróxi aromático (com base em uma comparação de pontos de ebulição padrão) é 10°C ou maior que o ponto de ebulição padrão do álcool.

Além disso, transesterificação é preferivelmente realizada por um método contínuo para permitir transesterificação prosseguir eficientemente. Isto é, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima e a composição de hidróxi aromático são continuamente fornecidas a um reator, transesterificação é realizada, álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima que é formado é extraído a partir do reator na forma de um componente gasoso, e um líquido de reação contendo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído formado e a composição de hidróxi aromático é continuamente extraída a partir do fundo do reator.

Embora o material do reator e das linhas usadas para efetuar transesterificação possa ser de materiais conhecidos desde que eles não tenham um efeito prejudicial sobre as substâncias iniciais e reagentes, materiais tais como SUS304, SUS316 ou SUS316L são baratos e pode ser usado preferivelmente. Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou um condensador e semelhantes podem ser adicionados como necessário, o método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser

usado para aquecer, e o método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriar. Etapas podem também ser adicionadas como necessário. Por exemplo, etapas e aparelhos aptos a serem projetados por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser adicionados, tais como uma etapa de dissolver o composto hidróxi aromático, uma etapa de separar o álcool, uma etapa de separar e/ou purificar o composto hidróxi aromático, uma etapa de purificar o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir do líquido de reação formado ou uma etapa de incinerar ou descartar subprodutos e semelhantes. Não existem limitações particulares no tipo de reator, e um reator tipo tanque ou um tipo coluna conhecido pode ser usado. Vários métodos conhecidos são usados para tal reator, exemplos dos quais podem incluir tipo usando reatores contendo um tanque de agitação, um tanque de agitação de estágios múltiplos, uma coluna de destilação, uma coluna de destilação de estágios múltiplos, um reator multitubular, uma coluna de destilação de estágios múltiplos contínua, uma coluna recheada, um evaporador de película fina, um reator provido com suporte dentro, um reator de circulação forçada, um evaporador de película descendente, um evaporador descendente, um reator de fluxo de gotejamento ou uma coluna de borbulhamento, e tipo usando combinações destes. Métodos usando um evaporador de película fina ou um reator tipo coluna são preferíveis do ponto de vista de eficientemente deslocar o equilíbrio para o lado dos produtos, enquanto uma estrutura tendo uma área de contato de gás-líquido grande é preferível para estar apto a rapidamente transferir o álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima formado para uma fase gasosa.

Uma coluna de destilação de estágios múltiplos refere-se a uma coluna de destilação tendo estágios múltiplos em que o número de placas teóricas de destilação é 2 ou mais, e qualquer coluna de destilação de estágios múltiplos pode ser utilizada desde que permita destilação contínua. Qualquer

coluna de destilação de estágios múltiplos pode ser usada para a coluna de destilação de estágios múltiplos desde que seja comumente usada como uma coluna de destilação de estágios múltiplos, exemplos dos quais podem incluir tipo coluna de bandeja usando uma bandeja tal como uma bandeja de borbulhamento, uma bandeja de placa porosa, uma bandeja de válvula ou uma bandeja contra corrente, e coluna recheada tipo recheada com vários tipos de materiais de recheio tais como um anel de raschig, um anel de Lessing, um anel de polo, sela de Berl, sela intertrava, um recheio de Dixon, um recheio de McMahon, Helipack, um recheio de Sulzer ou Mellapak. Qualquer coluna recheada pode ser usada desde que a coluna seja recheada com material de recheio conhecido como descrito acima. Ademais, uma combinação tipo bandeja-coluna recheada é também usada preferivelmente que combina uma porção de bandeja com uma porção recheada com um material de recheio.

Uma linha para alimentar gás inerte e/ou solvente inerte líquido a partir da menor porção do reator pode ser separadamente fixada, e no caso a mistura do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído alvo e composto hidróxi aromático contém O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima, uma linha pode ser fixada para circular novamente toda ou uma porção da mistura para o reator. Além disso, no caso de usar o solvente inerte mencionado acima, o solvente inerte pode estar na forma de um gás e/ou um líquido.

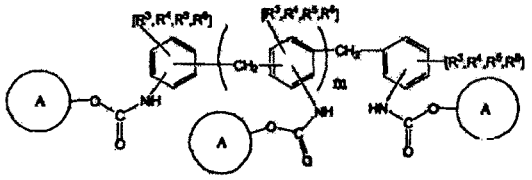
O componente gasoso extraído a partir do reator contendo álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima é preferivelmente purificado usando o método conhecido tal como eles que usa uma coluna de destilação, e pode ser reutilizado como um álcool de etapa (A) e/ou etapa (R).

Etapa (C) é uma etapa de obter O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-(R^2 ou aril)

éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-), por reticulação pelo menos um tipo de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (ou líquido de reação contendo o mesmo) obtido em etapa (P) com grupos metileno (-CH_2-). Como um resultado de realizar etapa (C), O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é obtido em que pelo menos duas moléculas de pelo menos um tipo de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (150) são reticuladas com os grupos metileno (-CH_2-). Aqui, quando realizando via 2), uma composição de hidróxi aromático contendo um composto hidróxi aromático é preferivelmente usada para o composto hidróxi aromático usado em etapa (A) e/ou etapa (R) e/ou etapa (P) como previamente descrito (isto é, um composto hidróxi aromático em que b=1 no composto hidróxi aromático representado por fórmula (2)). Embora um composto hidróxi aromático polivalente possa ser usado, reticulação pode ocorrer em locais diferentes dos locais desejados nesta vez. Na seguinte fórmula (150), no caso de usar o composto hidróxi aromático acima mencionado (isto é no caso b=1), anel A da seguinte fórmula não tem outro grupos hidróxi aromático ou grupos hidróxi alcoólicos. Um composto hidróxi aromático representado por uma fórmula mencionada acima (31) é preferível para o composto hidróxi aromático, o caso de usar um composto hidróxi aromático ativo representado por fórmula (38) é mais preferível, e o caso de usar um composto hidróxi aromático representado por fórmula (38), em que grupos R^{26} e R^{27} são átomos de hidrogênio enquanto outros substituintes são grupos alquila saturados lineares e/ou cíclicos, ou o caso de ser naftol (incluindo isômeros), fenoxifenol (incluindo isômeros) ou difenoxifenol (incluindo isômeros), em que a posição orto ou posição para do grupo hidróxi não é substituída, é ainda mais preferível.

Embora compostos em que m é um inteiro de 0 a 6 são representados pela fórmula (150), este valor pode ser ajustado de acordo com a

quantidade usada e taxa de reação do agente de reticulação metilenante que é reagido (a ser subsequentemente explicado e frequentemente referido como um agente metilenante):



(150)

(em que

R^1 representa um grupo derivado de uma amina primária orgânica como previamente definido,

anel A representa um grupo derivado de um composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático como previamente definido, e que representa um resíduo em que pelo menos um átomo de hidrogênio de grupos hidroxila diretamente ligado a um anel de hidrocarboneto aromático foi removido a partir do composto hidróxi aromático,

grupos R^3 a R^6 representam grupos previamente definidos, e

m representa um inteiro de 0 a 6).

Embora um monoisocianato pode ser produzido aplicando o O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído representado por uma fórmula mencionada acima (149) para uma reação de decomposição térmica como tal, quando considerando que isocianatos são tipicamente usados em aplicações tais como tinta e poliuretano, o isocianato é preferivelmente um isocianato polifuncional. Deste modo, um método pode ser realizado em que, após ter preliminarmente polimerizado o O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído pela etapa (C) mencionada acima, o polímero é aplicado para uma reação de decomposição térmica para obter um isocianato polifuncional.

O seguinte provê uma explicação da etapa (C). Na seguinte explicação, o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (P)

de via 4) é frequentemente indicado como O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído ou monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído .

O método conhecido (ver, por exemplo, Patente da República Federal da Alemanha No. 1042891) pode ser usado para a etapa (C).

Antes de realizar etapa (C), a composição de hidróxi aromático obtida em etapa (P) é separada a partir do líquido de reação contendo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído resultante. Embora etapa (C) pode ser realizada na presença de um composto hidróxi aromático, uma vez que o composto hidróxi aromático pode ser reticulado pelo agente de reticulação metilenante resultando na formação de subprodutos tais como compostos poli-hidróxi aromático, ou a quantidade de agente de reticulação metilenante usada pode aumentar, compostos hidróxi aromático são preferivelmente separados. O método conhecido pode ser usado para o método de separação, e embora variando de acordo com os compostos usados, exemplos de métodos de separação que podem ser usados podem incluir um método de destilação, uma separação de extração método que usa a diferença em solubilidade entre o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e composto hidróxi aromático, e um método de filtração realizado solidificando quer o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído ou composto hidróxi aromático. Embora estes métodos não possam ser indicados especificamente uma vez que eles dependem das respectivas propriedades físicas dos compostos usados, o método e condições destes podem ser adequadamente selecionados dentro do escopo de conhecimento de uma pessoa versada na técnica.

Quando realizando etapa (C), o composto hidróxi aromático é removido até a quantidade de composto hidróxi aromático presente seguindo o procedimento de separação mencionado acima é uma razão estequiométrica de 1 vez ou menos, preferivelmente 0,5 vezes e mais preferivelmente 0,1 vezes

baseada no O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Nesta vez, o composto hidróxi aromático pode ser removido na presença de solvente usado em etapa (C) para ser subsequentemente explicado.

Exemplos de agentes de reticulação metilenante preferivelmente usados na etapa (C) podem incluir formaldeído, paraformaldeído, trioxano, dialcoximetanos tendo um grupo alquila menor tendo 1 a 6 átomos de carbono (tais como dimetoximetano, dietoximetano, dipropoximetano, dipentanoximetano ou dihexiloximetano), e diaciloximetanos tendo um menor grupo carboxila tais como diacetoximetano ou dipropioximetano. Estes podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como uma mistura. Dentre estes agentes metilenantes, soluções aquosas de formaldeído são particularmente preferíveis em consideração de casos de aplicação industrial, facilidade de manuseio do agente de reticulação metilenante e semelhantes.

Ao realizar a reação da etapa (C), embora não existam limitações particulares na razão de O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído para agente de reticulação metilenante, o O-monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído é preferivelmente usado em uma razão estequiométrica de 2 to 20 vezes o agente de reticulação metilenante. Embora a formação de formas polinucleares (referindo-se a O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído em que três ou mais anéis aromáticos (anéis aromáticos derivados de amina primária orgânica) são ligados por uma estrutura reticulada de metileno, ou em outras palavras, compostos em que m é um inteiro de 1 ou mais na fórmula mencionada acima (150)), seja inibida com maior quantidade de monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído usada, se uma quantidade muito excessiva de monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído for usada, existem muitos casos em que a quantidade restante de O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído de matéria prima aumenta. Deste modo, a quantidade de monoaril éster de ácido carbâmico

N-substituído usada em termos da razão estequiométrica com o agente de reticulação metilenante está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 3 a 15 vezes e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa de 5 a 10 vezes.

Um catalisador ácido é preferivelmente usado como um catalisador na reação de condensação. Exemplos de catalisador ácidos podem incluir ácidos inorgânicos tais como ácido clorídrico, ácido sulfúrico, ácido fosfórico ou ácido bórico, e ácidos orgânicos tais como ácido fórmico, ácido acético, ácido oxálico ou ácido toluenossulfônico. Além disso, ácidos referidos como ácidos super fortes tais como ácido bromídrico, ácido perclórico, ácido clorossulfônico ou ácido trifluormetanossulfônico são também efetivos. Além disso, resinas de troca iônica tendo grupos acídicos tais como grupos carboxila ou grupos sulfonato bem como ácidos referidos como ácidos de Lewis, tais como ácido trifluorbórico, cloreto de ferro, cloreto de alumínio, cloreto de zinco ou cloreto de titânio, são também efetivos.

No caso de um ácido protônico tais como os ácidos inorgânicos mencionados acima, ácidos orgânicos ou ácidos super fortes, a quantidade destes ácidos usados está dentro de uma faixa de uma razão estequiométrica de 0,001 a 10, e preferivelmente dentro de uma faixa de 0,01 a 5, com base no éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima. Além disso, no caso estes ácidos são usados na forma de soluções aquosas, eles podem ser usados em uma concentração dentro de uma faixa de 10 a 95% em peso e preferivelmente dentro de uma faixa de 20 a 80% em peso com base na quantidade de água no sistema de reação. Se a concentração é menor que 10% em peso, a taxa de reação da reação de condensação torna-se extremamente baixa, enquanto se a concentração excede 95% em peso, hidrólise da matéria prima e outras reações laterais indesejáveis podem ocorrer.

A reação de condensação pode ser realizada na presença ou ausência de solvente. Exemplos de solventes que são usados preferivelmente

podem incluir hidrocarbonetos lineares, ramificados ou cíclicos tais como pentano, hexano, heptano, octano, nonano, decano, hexadecano, ciclopentano ou ciclo-hexano; hidrocarbonetos aromáticos tais como benzeno, tolueno ou xileno e suas formas alquil-, halogeno- e nitro-substituídas; hidrocarbonetos halogenados tais como clorofórmio, cloreto de metileno, tetracloreto de carbono, dicloroetano, tricloroetano ou tetracloroetano; alquil ésteres alifáticos tais como acetato de metila ou acetato de etila; e éteres tais como dietil éter, diisopropil éter, dioxano ou tetrahidrofurano. Além disso, tioacetais, acetais ou acilas são usados preferivelmente uma vez que eles não formam formaldeído livre sob as condições de reação e não substancialmente formam água reagindo com água formada como um subproduto na reação. Acetais e acilas são usados particularmente preferivelmente. Além disso, os ácidos mencionados acima por si só são também preferivelmente usados como solventes. Estes solventes podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como uma mistura.

Estes solventes podem ser usados em uma razão de peso dentro de uma faixa de 0,1 a 100 vezes e preferivelmente dentro de uma faixa de 0,2 a 50 vezes baseada na O-monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima.

A temperatura de reação é preferivelmente de 10 a 160°C, mais preferivelmente de 20 a 140°C e ainda mais preferivelmente de 50 a 120°C. Embora a reação é vantajosamente realizada em uma temperatura elevada a fim de aumentar a taxa de reação e completar a reação rapidamente, uma temperatura excessivamente elevada pode causar reações laterais indesejáveis tais como hidrólise.

Embora variando de acordo com o método de reação, compostos usados e condições de reação, o tempo de reação pode estar dentro de uma faixa de 1 minuto a 20 horas. Além disso, a reação pode ser terminada quando a

redução na quantidade de monoaril éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima alcançou certo nível amostrando o líquido de reação e usando o método analítico conhecido tais como cromatografia líquida, ou a reação pode ser terminada quando o peso molecular médio do produto na forma de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído alcançou certo nível usando o método analítico conhecido tais como cromatografia de permeação de gel.

O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido pelo método descrito acima é um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado por uma fórmula mencionada acima (150). Embora aqueles O-aril ésteres de ácido carbâmico N-substituído em que m é 0 são preferíveis em consideração facilidade de manuseio e particularmente viscosidade de solução e semelhantes, não há problemas com contendo formas trinucleares ou polinucleares maiores (isto é, compostos representados por fórmula (150) em que m é 1 ou mais) desde que eles não contradigam o significado da presente forma de realização.

O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (C) é preferivelmente usado em etapa (F).

Compostos permanecendo no líquido de reação de etapa (C) podem ser removidos a partir do líquido de reação (tais como o agente metilenante, solvente de reação ou catalisador usado em etapa (C)). O método conhecido pode ser usado para o método de remoção, e embora exemplos de tais métodos possam incluir separação de membrana, separação destilativa e cristalização, separação destilativa é preferível. No caso de remover um composto permanecendo no líquido de reação de etapa (C) por separação destilativa, adicionando a composição de hidróxi aromático usada na subsequente etapa (F) para o líquido de reação de etapa (C) para obter um líquido misturando, seguido separando por destilação os compostos permanecendo no líquido de reação de etapa (C) (tais como o agente

metilenante, solvente de reação ou catalisador usado em etapa (C)) a partir do líquido misturando, separação destilativa pode ser realizada sem causar precipitação do éster de ácido carbâmico N-substituído, assim tornando este método preferível.

Embora cuidado seja necessário com relação aos materiais do reator e do condensador uma vez que um ácido é usado em etapa (C), não existem limitações particulares nos materiais desde que eles não possam causar problemas tais como corrosão atribuível aos compostos usados em etapa (C), e os materiais conhecidos podem ser usados. Exemplos de materiais que podem ser usados podem incluir vidro, aço inoxidável, aço carbono, Hastelloy, materiais base revestidos com vidro e materiais revestidos com Teflon (marca registrada). Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou um condensador e semelhantes podem ser adicionados como necessário, o método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser usado para aquecer, e o método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriar. Etapas podem também ser adicionadas como necessário, e por exemplo, etapas e aparelhos aptos a serem projetados por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser adicionados.

<Via 5)>

Via 5) é um método para realizar etapa (R), realizando etapa (C) e realizando etapa (P). Via 5) é um aspecto do método indicado em via 3).

O método de via 5) é um método para obter O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-), a partir do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) realizando uma etapa (C) seguinte após etapa (R), em que a amina primária

orgânica usada em etapa (A) é uma monoamina primária orgânica aromática representada pela seguinte fórmula (5), e então realizando etapa (P) para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e composição de hidróxi aromático, em que pelo menos duas moléculas do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com os grupos metileno (-CH_2-), reagindo o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com os grupos metileno (-CH_2-), e a composição de hidróxi aromático.

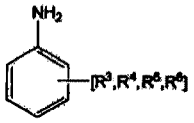
Etapa (C): uma etapa de obter O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-), reagindo o O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com formaldeído ou um agente de reticulação metilenante e grupos aromáticos de reticulação derivados da monoamina primária orgânica aromática contida no O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com os grupos metileno (-CH_2-).

O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído desta via 5) refere-se a O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído formado em quantidade de traços quando usando uma composição de hidróxi aromático em etapa (A) e/ou etapa (R).

Nesta via, etapa (A) é realizada usando uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (5) para a amina primária orgânica para obter um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (1) derivado da amina primária orgânica, seguido por realização da etapa (R) para obter um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído, realizando etapa (C) para obter O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-R^2 éster de

ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-), e finalmente realizando etapa (P) para obter um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e composição de hidróxi aromático, em que o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-).

Isto é, a amina primária orgânica usada nesta via é uma amina primária orgânica representada por fórmula (5), o composto tendo grupos ureído obtidos em etapa (A) desta via é um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (41) derivado da amina primária orgânica, e mais especificamente um composto tendo grupos ureído representados por fórmula (148), o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) desta via é um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído em que r=1 que é representado por fórmula (49) e derivado dos grupos ureído e um álcool, e mais especificamente um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (146), o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (C) desta via é um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (151) derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, e o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (P) desta via é um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado por fórmula (150) derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático. Indicações de exemplos específicos de cada um destes compostos estão respectivamente contidas em explicações prévias dos mesmos.



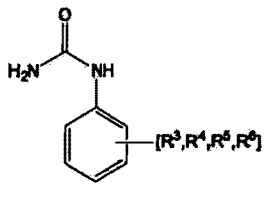
(5)

(em que

pelo menos um local na posição orto e/ou posição para do grupo NH_2 de uma monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula

(5) não é substituída, grupos R^3 a R^6 respectivamente representam um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel, grupos R^3 a R^6 podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^3 a R^6 podem juntos ligar-se para formar um anel com um anel aromático, grupos R^3 a R^6 são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre grupos compostos de grupos em que um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono de grupos R^3 a R^6 é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e o número total de átomos de carbono que compõe a monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) é um inteiro de 6 a 13).

Neste caso, o composto tendo grupos ureído obtidos em etapa (A) é pelo menos um tipo de composto tendo grupos ureído representado pela seguinte fórmula (148). Além disso, os grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 na seguinte fórmula (148) são selecionados a partir dos grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 de uma amina primária orgânica representada por uma fórmula mencionada acima (5), e é um composto em que grupos amino (-grupos NH_2) da amina primária orgânica representada por fórmula (5) são na forma de grupos ureído (-NH-CO-NH_2):



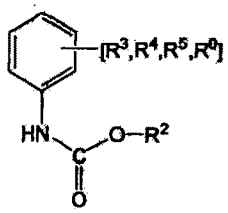
(148)

(em que

pelo menos um local na posição orto e/ou posição para do grupo ureído de uma monouréia orgânica aromática N-substituída representado por fórmula (148) não é substituída, grupos R^3 a R^6 respectivamente representam

um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel, grupos R^3 a R^6 podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^3 a R^6 podem juntos ligar-se para formar um anel com um anel aromático, grupos R^3 a R^6 são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre grupos compostos de grupos em que um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono de grupos R^3 a R^6 é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e o número total de átomos de carbono que compõe a monouréia orgânica aromática N-substituída representada por fórmula (148), excluindo grupos ureído (-NH-CO-NH_2), é um inteiro de 6 a 13).

Neste caso, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) realizando etapa (A) é pelo menos um tipo de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (146). Além disso, os grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 na seguinte fórmula (146) são selecionados a partir dos grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 de um composto tendo grupos ureído representado por uma fórmula mencionada acima (148), e é um composto em que grupos ureído (-NH-CO-NH_2) de um composto tendo grupos ureído representado por fórmula (148) são na forma de grupos de O-R^2 éster de ácido carbâmico do grupo R^2 derivando a partir de álcool:



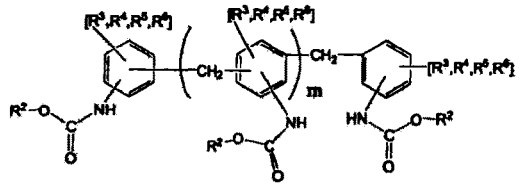
(146)

(em que

grupos R^2 a R^6 são os grupos indicados acima).

Neste caso, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido

em etapa (C) realizando etapa (R) é pelo menos um tipo de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representado pela seguinte fórmula (151). Além disso, os grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 na seguinte fórmula (151) são selecionados a partir dos grupos R^3, R^4, R^5 e R^6 de uma amina primária orgânica representada por uma fórmula mencionada acima (5):



(151)

(em que

grupos R^2 a R^6 são os grupos indicados acima, e m é um inteiro de 0 a 6).

Em etapas (A) e (R) desta via, a amina primária orgânica usada é uma amina primária orgânica representada por fórmula (5), e etapas (A), (R) e (P) desta via são realizadas sob as condições de etapas (A) e (R) de via 4). Além disso, etapa (C) desta via é realizada sob as condições de etapa (C) de via 4) com a exceção que a matéria prima reagida é O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído. Além disso, em contraste à matéria prima usada em via 4) sendo O-mono(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, etapa (P) desta via é realizada sob as condições de etapa (P) descrita em via 4) com a exceção da matéria prima usada sendo um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído em que o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é reticulado com grupos metileno (-CH_2-).

Embora variando de acordo com os compostos reagidos, as condições de reação para produzir O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e um álcool de etapa (R) são tais que a quantidade de álcool usada tem uma razão estequiométrica dentro de uma faixa de 1 a 500 vezes baseada nos grupos ureído do composto tendo grupos

ureído usados. Embora seja preferível usar um excesso de álcool uma vez que compostos carbonila complexamente substituídos e compostos de peso molecular elevados tendo ligações carbonila em moléculas deste formam facilmente se a razão estequiométrica é menor que 1 vez, em consideração do tamanho do reator, a razão estequiométrica está preferivelmente dentro de uma faixa de 1 a 200 vezes, mais preferivelmente dentro de uma faixa de 1,5 a 100 vezes e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa de 2 a 50 vezes.

Embora variando de acordo com os compostos usados, a temperatura de reação está preferivelmente dentro de uma faixa de 100 a 350°C. Se a temperatura é menor que 100°C, a reação fica lenta ou a reação dificilmente prossegue de qualquer modo, ou compostos carbonila complexamente substituídos aumentam, assim tornando isso indesejável. Por outro lado, em temperaturas maiores que 350°C, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído tampouco permanece em etapa (A), a uréia (e éster de ácido carbâmico não N-substituído) formada no sistema de etapa (R) decompõe, a composição de hidróxi é submetido a reações de desnaturação desidrogenativa, ou decomposição e desnaturação do produto na forma de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído ocorrem facilmente, assim tornando isso indesejável. A partir de tais pontos de vista, a temperatura de reação está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 120 a 320°C e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa de 140 a 300°C.

Como foi previamente descrito, a reação pela qual O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é formado é uma reação de equilíbrio, e uma vez que a reação é inclinada para o lado de reagentes, a reação é preferivelmente realizada enquanto removendo amônia formada como um subproduto para fora do sistema tanto quanto possível. Amônia é preferivelmente removida de modo que a concentração de amônia no líquido de reação é preferivelmente 1000 ppm ou menos, mais preferivelmente 300 ppm

ou menos, ainda mais preferivelmente 100 ppm ou menos e mais preferivelmente 30 ppm ou menos (estando contida no líquido de reação refere-se a estando contido em uma fase líquida quando realizando a etapa (R)). Amônia pode ser removida usando métodos tais como destilação reativa, uso de um gás inerte, separação de membrana e separação adsortiva. Por exemplo, a destilação reativa refere-se a um método para separar amônia continuamente formada durante a reação por destilação na forma de um gás. Isso pode ser realizado enquanto fervendo álcool, um solvente ou composição de hidróxi a fim de aumentar a eficiência de destilação da amônia. Além disso, um método usando um gás inerte refere-se a um método para separar amônia continuamente formada durante a reação a partir do sistema de reação na forma de um gás junto com o gás inerte. Exemplos de gases inertes usados podem incluir nitrogênio, hélio, argônio, dióxido de carbono, metano, etano e propano, estes podem ser usados sozinhos ou como uma mistura, e um método em que o gás inerte é introduzido no sistema de reação é preferível. Exemplos de adsorventes usados em métodos usando separação adsortiva podem incluir adsorventes aptos a serem usados sob as condições de temperatura em que a reação é realizada, tais como sílica, alumina, vários tipos de zeólito ou terra diatomácea. Estes métodos para remover amônia para fora do sistema podem ser realizados sozinhos ou uma pluralidade de tipos pode ser realizada em combinação.

Um catalisador pode ser usado na reação para o propósito de aumentar a taxa de reação, por exemplo. Exemplos de catalisadores que são usados preferivelmente podem incluir catalisadores básicos tais como metilatos, etilatos ou butiratos (incluindo isômeros) de lítio, sódio, potássio, cálcio ou bário, elementos terrosos raros, antimônio ou bismuto sozinho ou óxidos, sulfetos e sais destes, boro sozinho ou compostos de boro, metais da família de cobre, família de zinco, família de alumínio, família de carbono e família de

titânio na tabela periódica bem como óxidos de metal e sulfetos destes, e carbetos e nitretos de elementos da família de carbono excluindo carbono, família de titânio, família de vanádio e família de cromo na tabela periódica. Embora não existam limitações particulares na quantidade de catalisador usada no caso de usar um catalisador, um catalisador pode ser usado dentro da faixa de uma razão estequiométrica de 0,0001 a 100 vezes os grupos ureído do composto tendo grupos ureído.

Embora variando de acordo com a composição do sistema de reação, temperatura de reação, método usado para remover amônia, aparelho de reação e semelhantes, a pressão de reação está geralmente dentro de uma faixa de preferivelmente de 0,01 Pa a 10 MPa (pressão absoluta), e em consideração de facilidade da aplicação industrial, a pressão de reação está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 0,1 Pa a 5 MPa (pressão absoluta), e em consideração de remover amônia gasosa para fora do sistema, ainda mais preferivelmente de 0,1 Pa a 1,5 MPa (pressão absoluta).

Embora variando de acordo com a composição do sistema de reação, temperatura de reação, método usado para remover amônia, aparelho de reação, pressão de reação e semelhantes, o tempo de reação (tempo de residência no caso de uma reação contínua) é geralmente de 0,01 a 100 horas. O tempo de reação pode também ser determinado de acordo com a quantidade de formação do composto alvo na forma de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído). Por exemplo, a reação pode ser parada após ter amostrado o líquido de reação, determinado o teor de éster de ácido carbâmico N-substituído no líquido de reação (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído) e confirmar que o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído foi formado em

um rendimento de 10% ou mais com base no composto tendo grupos ureído, ou a reação pode ser parada após ter confirmado que o rendimento é 90% ou mais. O líquido de reação contendo o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) é convertido para O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em um processo que contém etapa (P) a ser subsequentemente descrito, seguido obtendo um isocianato em etapa (F). Nesta vez, se o teor de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído em etapa (R) é baixo (o rendimento deste é baixo), há casos em que isso pode causar uma diminuição no rendimento de isocianato. Deste modo, o rendimento do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é preferivelmente 50% ou mais, mais preferivelmente 80% ou mais e ainda mais preferivelmente 90% ou mais.

Embora o uso de um solvente de reação não seja necessariamente requerido na reação, um solvente adequado é preferivelmente usado como um solvente de reação para o propósito de facilitar o procedimento de reação, exemplos dos quais podem incluir alcanos tais como pentano (incluindo isômeros), hexano (incluindo isômeros), heptano (incluindo isômeros), octano (incluindo isômeros), nonano (incluindo isômeros) ou decano (incluindo isômeros); hidrocarbonetos aromáticos e hidrocarbonetos aromáticos substituídos de alquila tais como benzeno, tolueno, xileno (incluindo isômeros), etil benzeno, diisopropil benzeno (incluindo isômeros), dibutil benzeno (incluindo isômeros) ou naftaleno; compostos nitrila tais como acetonitrila ou benzonitrila; compostos aromáticos substituídos com um grupo halogênio ou nitro tais como clorobenzeno, diclorobenzeno (incluindo isômeros), bromobenzeno, dibromobenzeno (incluindo isômeros), cloronaftaleno, bromonaftaleno, nitrobenzeno ou nitronaftaleno; compostos de hidrocarboneto policíclico tais como difenila, difenila substituída, difenil metano, terfenila, antraceno ou dibenzil tolueno (incluindo isômeros); hidrocarbonetos alifáticos tais como ciclo-hexano, ciclopentano, ciclooctano ou etilciclo-hexano; cetonas

tais como metil etil cetona ou acetofenona; ésteres tais como ftalato de dibutila, dihexila ftalato, ftalato de dioctila ou ftalato de benzilbutila; éteres e tioéteres tais como tetrahidrofurano, 1,4-dioxano, 1,2-dimetoxietano, difenil éter ou sulfeto de difenila; compostos cetona tais como acetona ou metil etil cetona; compostos éster tais como acetato de etila ou benzoato de etila; e sulfóxidos tais como dimetilsulfóxido ou difenilsulfóxido. Naturalmente, uma composição de hidróxi usada em excesso na reação é também preferivelmente usada como um solvente de reação.

A reação é realizada em um sistema tendo uma fase gasosa contendo uma composição hidróxi, um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia (um composto que herda um grupo carbonila possuído por uréia, tais como um éster de ácido carbâmico não N-substituído ou biureto, que se refere a um composto excluindo O-ésteres de ácido carbâmico N-substituído) e amônia produzida como um subproduto na reação, e uma fase líquida em que a reação é realizada. Embora a maior parte da reação seja realizada na fase líquida, pode também ser realizada na fase gasosa dependendo das condições de reação. Nesta vez, o conteúdo volumétrico da fase líquida na reação em que a reação é realizada é preferivelmente 50% ou menos. No caso de realizar a reação continuamente durante um longo período de tempo, embora subprodutos poliméricos possam se formar devido a flutuações em condições de operação (tais como temperatura ou pressão) e semelhantes, se o conteúdo volumétrico da fase líquida no reator é elevado, adesão e acúmulo de tais subprodutos poliméricos no reator podem ser evitados. No entanto, uma vez que a eficiência de remoção de subproduto amônia pode tornar-se pobre e o rendimento do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído (e dependendo do caso, a quantidade total resultando a partir de adicionar a quantidade de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído) pode diminuir se o conteúdo volumétrico da fase líquida é excessivamente elevado, o conteúdo volumétrico

da fase líquida com base na fase gasosa é preferivelmente 50% ou menos, mais preferivelmente 30% ou menos e ainda mais preferivelmente 20% ou menos (o conteúdo volumétrico da fase líquida refere-se a razão volumétrica da fase líquida baseada no volume da tanque de reação no caso de um reator tipo tanque, o volume do estágio menos que o estágio de alimentação (não incluindo o fundo de tanque e refervedor) no caso de um reator tipo coluna, ou o volume do destilador de película fina no caso de a destilador de película fina).

Embora não existam limitações particulares no aparelho de reação usado quando realizando a reação e um reator conhecido pode ser usado, um reator tipo tanque e/ou tipo coluna é usado preferivelmente. O reator usado é preferivelmente equipado com um condensador.

Como foi previamente descrito, a reação é preferivelmente realizada em um sistema contendo a fase gasosa contendo uma composição hidróxi, um composto tendo grupos carbonila derivados de uréia e amônia produzida como um subproduto na reação, e uma fase líquida em que a reação é realizada, e sob condições tal que o conteúdo volumétrico da fase líquida no reator em que a reação é realizada é 50% ou menos, e um reator que atende a estas condições é selecionado para o reator em que a reação é realizada.

Mais especificamente, reatores convencionalmente conhecidos podem ser adequadamente combinados e usados, exemplos dos quais podem incluir um tanque de agitação, um tanque de agitação pressurizado, um tanque de agitação despressurizado, um reator tipo coluna, uma coluna de destilação, uma coluna recheada ou um destilador de película fina.

Não existem limitações particulares no tipo de condensador provido no reator e o condensador conhecido pode ser usado. Por exemplo, convencionalmente condensadores conhecidos tais como um condensador cilíndrico multitubular, um condensador de tubo duplo, um condensador de tubo simples ou um condensador resfriado por ar podem ser adequadamente

combinados e usados. O condensador pode ser provido dentro do reator ou fora do reator, ou pode ser conectado com o reator por uma linha, e vários tipos podem ser empregados em consideração das formas do reator e condensador, uma maneira em que o líquido condensado é manuseado e semelhantes.

Não existem limitações particulares nos materiais do reator e condensador e materiais conhecidos podem ser usados. Exemplos de materiais que podem ser usados podem incluir vidro, aço inoxidável, aço carbono, Hastelloy, materiais base revestidos com vidro e materiais revestidos com Teflon (marca registrada). Materiais tais como SUS304, SUS316 ou SUS316L são baratos e pode ser usado preferivelmente. Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou um condensador e semelhantes podem ser adicionados como necessário, o método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser usado para aquecer, e o método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriar. Etapas podem também ser adicionadas como necessário. Por exemplo, etapas e aparelhos aptos a serem projetados por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser adicionados, tais como uma etapa de dissolver o composto tendo grupos ureído na composição de hidróxi aromático, uma etapa de dissolver o composto hidróxi aromático, uma etapa de separar álcool, uma etapa de separar e/ou purificar o composto hidróxi aromático, uma etapa de purificar O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído a partir do líquido de reação formado, ou uma etapa de incinerar ou descartar subprodutos e semelhantes.

Etapa (R) é uma etapa de produzir O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo um composto tendo grupos ureído e um álcool em uma fase líquida usando um reator (equipado com um condensador). O componente gasoso formado na etapa (R) contendo um composto tendo grupos carbonila

derivados de uréia e amônia formada como um subproduto na reação é introduzido no condensador provido no reator e todo ou uma porção do álcool e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia são condensados seguidos por recuperação de amônia na forma de um gás.

Nesta vez, o composto tendo grupos carbonila derivados de uréia que está contida em amônia recuperada como um gás a partir do condensador está presente em uma quantidade específica ou menos. Isto é, a razão do número de grupos carbonila (-C(=O)-) contido no composto tendo grupos carbonila derivados de uréia contida na amônia para o número de amônia moléculas é 1 ou menos, preferivelmente 0,5 ou menos, mais preferivelmente 0,1 ou menos e ainda mais preferivelmente 0,01 ou menos. A razão para fazer a quantidade do composto tendo grupos carbonila derivados de uréia contida na amônia estar dentro de uma faixa específica é evitar adesão e acúmulo de componentes sólidos na linha para transferir amônia a partir do condensador.

Embora todos componentes sólidos que aderem e se acumulam na linha para transferir amônia não possam ser identificados, como um resultado de estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, a maioria foi determinada para ser compostos tendo grupos carbonila. Embora um método possível para evitar a adesão e o acúmulo de tais componentes sólidos inclua o aquecimento da linha para transferir amônia para decompor compostos tendo grupos carbonila, de acordo com estudos conduzidos pelos inventores da presente invenção, existem muitos casos em que aquecer apenas causa polimerização de produtos de decomposição (tais como ácido isociânico) ou reação dos produtos de decomposição com outros compostos tendo grupos carbonila, assim tornando difícil evitar completamente adesão e acúmulo de componentes sólidos. Além disso, no caso de simplesmente aquecer a linha, foi determinado que compostos tendo grupos carbonila contidos na amônia e seus produtos de decomposição solidificam como um resultado de serem

rapidamente resfriados na saída da linha para transferir amônia (tais como a porção em contato com a atmosfera), assim frequentemente resultando em proeminente adesão e acúmulo de componentes sólidos. Como um resultado de conduzir estudos extensivos com relação a este problema, os inventores da presente invenção surpreendentemente encontraram que o problema de adesão e acúmulo de componentes sólidos pode ser resolvido levando a quantidade do composto tendo grupos carbonila derivados de derivado de ácido carbônico contida na amônia ser igual a ou menor que uma quantidade específica descrita acima. Embora o mecanismo pelo qual este efeito é demonstrado não seja claro, os inventores da presente invenção supuseram que a adesão e o acúmulo na linha são causados pelo composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico sozinho, bem como produtos de decomposição e/ou de polimerização do composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico, e que levando a quantidade de grupos carbonila contidos no composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico igual a ou menor que a concentração específica, adesão do composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico sozinho, bem como as taxas de reação de decomposição e/ou polimerização do composto são abaixadas consideravelmente.

Por outro lado, a composição de hidróxi condensada e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia são feitos para serem tal que a razão estequiométrica da composição de hidróxi condensada para o composto condensado tendo grupos carbonila derivados de uréia é 1 ou mais, preferivelmente 2 ou mais e mais preferivelmente 3 ou mais. A razão para definir tais faixas é possibilitar uma mistura da composição de hidróxi e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia condensados no condensador para estar na forma de uma mistura líquida homogênea. Como um resultado, não apenas é manuseio da mistura mais fácil, mas ocorrência de

problemas tais como adesão e acúmulo de componentes sólidos no condensador podem ser evitados.

Ademais, a mistura da composição de hidróxi e do composto tendo grupos carbonila derivados de uréia condensados pelo condensador em etapa (R) pode ser circulada dentro do reator e reutilizada na reação de etapa (A). Nesta vez, a quantidade de amônia contida na mistura é preferivelmente 5000 ppm ou menos, mais preferivelmente 3000 ppm ou menos e ainda mais preferivelmente 2000 ppm ou menos.

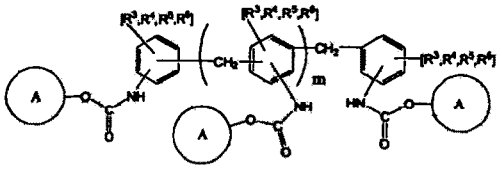
Como foi descrito acima, embora vários compostos sejam recuperados na forma de compostos tendo grupos carbonila derivados de uréia, não existem limitações particulares na reutilização de estes compostos.

Etapa (C) desta via é uma etapa de obter O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-), por reticulação pelo menos um tipo de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído (ou líquido de reação contendo o mesmo) obtido em etapa (R) com grupos metileno (-CH_2-). Como um resultado de realizar etapa (C), O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é obtido em que pelo menos duas moléculas de pelo menos um tipo de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído representado por uma fórmula mencionada acima (151) são reticuladas com os grupos metileno (-CH_2-).

Aqui, quando realizando via 5), preferivelmente um composto hidróxi aromático representado por fórmula (2), e mais preferivelmente um composto hidróxi aromático representado por fórmula (7), é usado para o composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático usada em etapa (A) e/ou etapa (R) como previamente descrito. Mais preferivelmente, o composto hidróxi aromático é aquele representado por fórmula (31), naftol (incluindo isômeros), fenoxifenol (incluindo isômeros) ou

difenoxifenol (incluindo isômeros), em que a posição orto ou posição para do grupo hidróxi não é substituída, ou um composto mono-hidróxi aromático em que grupos R^{19} e R^{23} de um composto hidróxi aromático representado por fórmula (31) são grupos alquila saturados lineares e/ou cíclicos. O composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático usada em etapa (P) de via 5) é preferivelmente um composto hidróxi aromático ativo, um composto hidróxi aromático selecionado dentre compostos hidróxi aromático representados por fórmula (32), e mais preferivelmente um composto hidróxi aromático representado por fórmula (38).

Embora compostos em que m é um inteiro de 0 a 6 são representados pelas fórmulas (151) e (150), este valor pode ser ajustado de acordo com a quantidade usada e taxa de reação do agente de reticulação metilenante que é reagido (a ser subsequentemente explicado e frequentemente referido como um agente metilenante):



(150)

(em que

R^1 representa um grupo derivado de uma amina primária orgânica como previamente definido,

anel A representa um grupo derivado de um composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático como previamente definido, e que representa um resíduo em que um átomo de hidrogênio simples de grupos hidroxila diretamente ligado a um anel de hidrocarboneto aromático foi removido a partir do composto hidróxi aromático, e

R^3 a R^6 representam grupos previamente definidos, e

m representa um inteiro de 0 a 6).

O seguinte provê uma explicação da etapa (C). Na seguinte explicação, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) de via 5) é frequentemente indicado como O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído ou mono O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído.

O método conhecido (ver, por exemplo, Patente da República Federal da Alemanha 1042891) pode ser usado para a etapa (C).

Antes de realizar etapa (C), no caso de ter usado uma composição de hidróxi aromático em etapa (R), a composição de hidróxi aromático obtida em etapa (R) é separada a partir do líquido de reação contendo o resultando O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído. Embora etapa (C) possa ser realizada na presença de um composto hidróxi aromático, uma vez que o composto hidróxi aromático pode ser reticulado pelo agente de reticulação metilenante resultando na formação de subprodutos tais como compostos poli-hidróxi aromático, ou a quantidade de agente de reticulação metilenante usada pode aumentar, compostos hidróxi aromático são preferivelmente separados. O método conhecido pode ser usado para o método de separação, e embora variando de acordo com os compostos usados, exemplos de métodos de separação que podem ser usados podem incluir um método de destilação, uma separação de extração método que usa a diferença em solubilidade entre o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e composto hidróxi aromático, e um método de filtração realizado solidificando quer o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído ou composto hidróxi aromático. Embora estes métodos não possam ser indicados especificamente uma vez que eles dependem das respectivas propriedades físicas dos compostos usados, o método e condições destes podem ser adequadamente selecionados dentro do escopo de conhecimento de uma pessoa versada na técnica.

Quando realizando etapa (C), o composto hidróxi aromático é

removido até a quantidade de composto hidróxi aromático presentes seguindo o procedimento de separação mencionado acima é uma razão estequiométrica de 1 vez ou menos, preferivelmente 0,5 vezes e mais preferivelmente 0,1 vezes com base no O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído. Nesta vez, o composto hidróxi aromático pode ser removido na presença de solvente usado em etapa (C) para ser subsequentemente explicado.

Exemplos de agentes de reticulação metilenantes preferivelmente usados na etapa (C) podem incluir formaldeído, paraformaldeído, trioxano, dialcoximetanos tendo um grupo alquila menor tendo 1 a 6 átomos de carbono (tais como dimetoximetano, dietoximetano, dipropoximetano, dipentanoximetano ou dihexiloximetano), e diaciloximetanos tendo um menor grupo carboxila tais como diacetoximetano ou dipropioximetano. Estes podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como a mistura. Dentre estes agentes de reticulação metilenante, soluções aquosas de formaldeído são particularmente preferíveis em consideração de casos da aplicação industrial, facilidade de manuseio do agente de reticulação metilenante e semelhantes.

Ao realizar a reação da etapa (C), embora não existam limitações particulares na razão de O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído para agente de reticulação metilenante, o O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído é preferivelmente usado em uma razão estequiométrica de 2 a 20 vezes o agente de reticulação metilenante. Embora a formação de formas polinucleares (referindo-se a O-R^2 ésteres de ácido carbâmico N-substituído em que três ou mais anéis aromáticos (anéis aromáticos derivados de amina primária orgânica) são ligados por uma estrutura reticulada de metileno, ou em outras palavras, compostos em que m é um inteiro de 1 ou mais na fórmula mencionada acima (151)), seja inibida com maior quantidade de mono (R^2 éster) ácido carbâmico N-substituído usada, se uma quantidade muito excessiva

de O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído for usada, existem muitos casos em que a quantidade restante de O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima aumenta. Deste modo, a quantidade de O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído usada em termos da razão estequiométrica com o agente de reticulação metilenante está mais preferivelmente dentro de uma faixa de 3 a 15 vezes e ainda mais preferivelmente dentro de uma faixa de 5 a 10 vezes.

Um catalisador ácido é preferivelmente usado como um catalisador na reação de condensação. Exemplos de catalisador ácidos podem incluir ácidos inorgânicos tais como ácido clorídrico, ácido sulfúrico, ácido fosfórico ou ácido bórico, e ácidos orgânicos tais como ácido fórmico, ácido acético, ácido oxálico ou ácido toluenossulfônico. Além disso, referidos ácidos como ácidos super fortes tais como ácido bromídrico, ácido perclórico, ácido clorossulfônico ou ácido trifluormetanossulfônico são também efetivos. Além disso, resinas de troca iônica tendo grupos acídicos tais como grupos carboxila ou grupos sulfonato bem como ácidos referidos como Ácidos de Lewis, tais como ácido trifluorbórico, cloreto de ferro, cloreto de alumínio, cloreto de zinco ou cloreto de titânio, são também efetivos.

No caso de um ácido protônico tais como os ácidos inorgânicos mencionados acima, ácidos orgânicos ou ácidos super fortes, a quantidade destes ácidos usados está dentro de uma faixa de uma razão estequiométrica de 0,001 a 10, e preferivelmente dentro de uma faixa de 0,01 a 5, com base no éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima. Além disso, no caso estes ácidos são usados na forma de soluções aquosas, eles podem ser usados em uma concentração dentro de uma faixa de 10 a 95% em peso e preferivelmente dentro de uma faixa de 20 a 80% em peso com base na quantidade de água no sistema de reação. Se a concentração é menor que 10% em peso, a taxa de reação da reação de condensação torna-se extremamente

baixa, enquanto se a concentração excede 95% em peso, hidrólise da matéria prima e outras reações laterais indesejáveis podem ocorrer.

A reação de condensação pode ser realizada na presença ou ausência de solvente. Exemplos de solventes que são usados preferivelmente podem incluir hidrocarbonetos lineares, ramificados ou cíclicos tais como pentano, hexano, heptano, octano, nonano, decano, hexadecano, ciclopentano ou ciclo-hexano; hidrocarbonetos aromáticos tais como benzeno, tolueno ou xileno e suas formas alquil-, halogeno- e nitro-substituídas; hidrocarbonetos halogenados tais como clorofórmio, cloreto de metileno, tetracloreto de carbono, dicloroetano, tricloroetano ou tetracloroetano; alquil ésteres alifáticos tais como acetato de metila ou acetato de etila; e éteres tais como dietil éter, diisopropil éter, dioxano ou tetrahidrofurano. Além disso, tioacetais, acetais ou acilas são usados preferivelmente uma vez que eles não formam formaldeído livre sob as condições de reação e não substancialmente formam água reagindo com água formada como um subproduto na reação. Acetais e acilas são usados particularmente preferivelmente. Além disso, os ácidos mencionados acima por si só são também preferivelmente usados como solventes. Estes solventes podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como uma mistura.

Estes solventes podem ser usados em uma razão de peso dentro de uma faixa de 0,1 a 100 vezes e preferivelmente dentro de uma faixa de 0,2 a 50 vezes baseada no O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima.

A temperatura de reação é preferivelmente de 10 a 160°C, mais preferivelmente de 20 a 140°C e ainda mais preferivelmente de 50 a 120°C. Embora a reação seja vantajosamente realizada em uma temperatura elevada a fim de aumentar a taxa de reação e completar a reação rapidamente, uma temperatura excessivamente elevada pode causar reações laterais indesejáveis

tais como hidrólise.

Embora variando de acordo com o método de reação, compostos usados e condições de reação, o tempo de reação pode estar dentro de uma faixa de 1 minuto a 20 horas. Além disso, a reação pode ser terminada quando a redução na quantidade de O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído - alcançou um certo nível amostrando o líquido de reação e usando o método analítico conhecido tais como cromatografia líquida, ou a reação pode ser terminada quando o peso molecular médio do produto na forma de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído alcançou um certo nível usando o método analítico conhecido tais como cromatografia de permeação de gel.

O O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido pelo método descrito acima é um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representado por uma fórmula mencionada acima (151). Embora aqueles O-R^2 ésteres de ácido carbâmico N-substituído em que m é 0 são preferíveis em consideração facilidade de manuseio e particularmente viscosidade de solução e semelhantes, não há problemas em conter formas trinucleares ou polinucleares maiores (isto é, compostos representados por fórmula (151) em que m é 1 ou mais) desde que eles não contradigam o significado da presente forma de realização.

O O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (C) é preferivelmente usado em etapa (P).

Compostos permanecendo no líquido de reação de etapa (C) podem ser removidos a partir do líquido de reação (tais como o agente metilenante, solvente de reação ou catalisador usado em etapa (C)). O método conhecido pode ser usado para o método de remoção, e embora exemplos de tais métodos possam incluir separação de membrana, separação destilativa e cristalização, separação destilativa é preferível. No caso de remover um composto permanecendo no líquido de reação de etapa (C) por separação

destilativa, adicionando a composição de hidróxi aromático usada na subsequente etapa (P) para o líquido de reação de etapa (C) para obter um líquido misturando, seguido por destilar e separar os compostos permanecendo no líquido de reação de etapa (C) (tais como o agente metilenante, solvente de reação ou catalisador usado em etapa (C)) a partir do líquido misturando, separação destilativa pode ser realizada sem causar precipitação do éster de ácido carbâmico N-substituído, assim fazendo este método preferível.

Embora cuidado seja necessário com relação aos materiais do reator e o condensador uma vez que um ácido é usado em etapa (C), não existam limitações particulares nos materiais desde que eles não possam causar problemas tais como corrosão atribuível aos compostos usados em etapa (C), e materiais conhecidos podem ser usados. Exemplos de materiais que podem ser usados podem incluir vidro, aço inoxidável, aço carbono, Hastelloy, materiais base revestidos com vidro e materiais revestidos com Teflon (marca registrada). Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou um condensador e semelhantes podem ser adicionados como necessário, o método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser usado para aquecer, e o método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriar. Etapas podem também ser adicionadas como necessário, e por exemplo, etapas e aparelhos aptos a serem projetados por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser adicionados.

<Etapa (P)> Etapa de transesterificação

Uma vez que esta etapa é uma etapa de converter o grupo éster do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, é também geralmente referida como uma "etapa de transesterificação" na presente forma de realização.

Etapa (P): uma etapa de obter O-aril éster de ácido carbâmico

N-substituído reagindo O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático (composição contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2)) em uma fase líquida e extraindo álcool formado como um subproduto para uma fase gasosa.

FIG. 6 mostra um desenho conceitual descrevendo a etapa (P).

Além disso, um álcool derivado de O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é formado na etapa (P). O seguinte provê uma explicação de etapa (P).

O composto hidróxi aromático na composição de hidróxi aromático reagida pode ser qualquer de um composto hidróxi aromático representado por uma fórmula mencionada acima (2), fórmula (7), fórmula (31), fórmula (32), fórmula (38), fórmula (39) ou fórmula (40). O caso em que um composto hidróxi aromático representado por fórmula (7) ou fórmula (31) está contido é preferível, o caso em que uma composição de hidróxi aromático é usada que contém um composto hidróxi aromático ativo representado por fórmula (32) é mais preferível, e o caso em que uma composição de hidróxi aromático é usada que contém um composto hidróxi aromático ativo representado por fórmula (38) é ainda mais preferível.

Vários métodos podem ser realizados para a etapa (P) de acordo com os compostos usados e semelhantes com referência aos métodos conhecidos (ver, por exemplo, WO 2008/059953).

Embora variando de acordo com os compostos reagidos, as condições de reação de etapa (P) são tais que a quantidade de composto hidróxi aromático na composição de hidróxi aromático usada tem uma razão estequiométrica dentro de uma faixa de 2 a 1000 vezes baseada nos grupos éster que compõe o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima. Embora seja preferível usar um excesso do composto hidróxi aromático

com base em grupos éster que compõe o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima a fim de completar a reação rapidamente, em consideração do tamanho do reator, a razão estequiométrica está preferivelmente dentro de uma faixa de 2 a 100 vezes e mais preferivelmente dentro de uma faixa de 5 a 50 vezes.

A temperatura de reação está geralmente dentro de uma faixa de 100 a 300°C, e uma temperatura elevada é preferível para aumentar a taxa de reação, mas uma vez que reações laterais podem ocorrer facilmente em elevadas temperaturas, a temperatura de reação está preferivelmente dentro de uma faixa de 150 a 250°C. O aparelho de resfriamento conhecido ou aparelho de aquecimento pode ser instalado no reator para manter uma temperatura de reação constante. Além disso, embora variando de acordo com os tipos de compostos usados e a temperatura de reação, a reação pode ser realizada em pressão reduzida, pressão normal ou pressão aumentada e geralmente em uma pressão de reação dentro de uma faixa de 20 a 1 x 10^6 Pa. Não existem limitações particulares no tempo de reação (tempo de residência no caso de um método contínuo), e é geralmente de 0,001 a 100 horas, preferivelmente de 0,01 a 50 horas e mais preferivelmente de 0,1 a 30 horas. Além disso, a reação pode ser terminada após confirmar que a quantidade desejada do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído alvo foi formada amostrando o líquido de reação e determinando a quantidade formada por cromatografia líquida, por exemplo.

Embora um catalisador não seja necessariamente requerido em etapa (P), um catalisador pode ser usado sem problema para abaixar a temperatura de reação ou completar a reação mais rapidamente. O catalisador é usado a 0,01 a 30% em peso e preferivelmente a 0,5 a 20% em peso com base no peso do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído. Exemplos de catalisadores podem incluir ácidos de Lewis bem como compostos de metal de

transição que formam um ácido de Lewis, compostos estanho orgânicos, metais de grupo cobre, compostos de metal de grupo zinco ou ferro, e mais especificamente, ácidos de Lewis e compostos de metal de transição que formam um ácido de Lewis representado por AlX_3, TiX_3, TiX_4, VOX_3, VX_5, ZnX_2, FeX_3 ou SnX_4(em que, X representa um halogênio, um grupo acetóxi, um grupo alcóxi ou um grupo ariloxi); compostos estanho orgânicos representado por $(CH_3)_3SnOCHCH_3$, $(C_2H_5)SnOCOC_6H_5$, $Bu_3SnOCOCH_3$, $Ph_3SnOCOCH_3$, $Bu_2Sn(OCOCH_3)_2$, $Bu_2Sn(OCOC_{11}H_{23})_2$, Ph_3SnOCH_3, $(C_2H_5)_3SnOPh$, $Bu_2Sn(OCH_3)_2$, $Bu_2Sn(OC_2H_5)_2$, $Bu_2Sn(OPh)_2$, $Ph_2Sn(CH_3)_2$, $(C_2H_5)_3SnOH$, PhSnOH, Bu_2SnO, $(C_8H_{17})_2SnO$, Bu_2SnCl_2 ou BuSnO(OH); compostos de metal de família do cobre representado por CuCl, $CuCl_2$, CuBr, $CuBR^2$, CuI, CuI_2, $Cu(OAc)_2$, $Cu(acac)_2$, olefinato de cobre, Bu_2Cu, $(CH_3O)_2Cu$, $AgNO_3$, AgBr, picrato de prata ou $AgC_6H_6ClO_4$; compostos de zinco representado por $Zn(acac)_2$; e, compostos de metal de família do ferro representado por $Fe(C_{10}H_8)(CO)_5$, $Fe(CO)_5$, $Fe(C_4H_6)(CO)_3$, $Co(mesitileno)_2(PEt_2Ph_2)$, $CoC_5F_5(CO)_7$ ou ferroceno. (Na listagem acima de exemplos, Bu refere-se a um grupo butila, Ph refere-se a um grupo fenila, e acac refere-se um ligante de acetil acetona quelato.) Aminas tais como 1,4-diazabiciclo[2,2,2]octano, trietilenodiamina ou trietilamina são adequadas para uso como catalisadores, enquanto catalisadores de metal orgânico tais como dilaurato de dibutil estanho, octoato de chumbo ou octoato estanhoso são particularmente preferíveis. Estes compostos podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como a mistura.

Embora o uso de um solvente de reação não seja necessariamente requerido na presente forma de realização, um solvente adequado inerte pode ser preferivelmente usado como um solvente de reação para o propósito de facilitar o procedimento de reação e semelhantes, exemplos dos quais podem incluir alcanos tais como hexano (incluindo isômeros), heptano (incluindo

isômeros), octano (incluindo isômeros), nonano (incluindo isômeros) ou decano (incluindo isômeros); hidrocarbonetos aromáticos e hidrocarbonetos aromáticos substituídos de alquila tais como benzeno, tolueno, xileno (incluindo isômeros), etil benzeno, diisopropil benzeno (incluindo isômeros), dibutil benzeno (incluindo isômeros) ou naftaleno; compostos aromáticos substituídos com um grupo halogênio ou nitro tais como clorobenzeno, diclorobenzeno (incluindo isômeros), bromobenzeno, dibromobenzeno (incluindo isômeros), cloronaftaleno, bromonaftaleno, nitrobenzeno ou nitronaftaleno; compostos de hidrocarboneto policíclico tais como difenila, difenila substituída, difenil metano, terfenila, antraceno ou dibenzil tolueno (incluindo isômeros); hidrocarbonetos alifáticos tais como ciclo-hexano, ciclopentano, ciclooctano ou etilciclo-hexano; cetonas tais como metil etil cetona ou acetofenona; ésteres tais como ftalato de dibutila, dihexila ftalato, ftalato de dioctila ou ftalato de benzilbutila; éteres e tioéteres tais como difenil éter ou sulfeto de difenila; sulfóxidos tais como dimetilsulfóxido ou difenilsulfóxido; e óleo de silicone. Estes solventes podem ser usados sozinhos ou dois ou mais tipos podem ser usados como uma mistura.

A reação de transesterificação na presente forma de realização é uma reação de equilíbrio. Deste modo, é preferível permitir a reação prosseguir enquanto removendo o produto na forma de álcool (álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima) a partir do sistema de reação a fim de efetuar transesterificação eficientemente. Deste modo, se o composto hidróxi aromático é selecionado tal que o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático usado em transesterificação é maior que o ponto de ebulição padrão do álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima, o composto tendo o menor ponto de ebulição padrão no sistema de reação torna o álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima, assim facilitando remoção de

produtos a partir do sistema de reação. Com base na descoberta de que geralmente separação destilativa industrialmente adequada é possível se os pontos de ebulição padrão de dois componentes a serem separados são 10°C ou maior, um composto hidróxi aromático é preferivelmente usado tal que o ponto de ebulição padrão do composto tendo o menor ponto de ebulição padrão na composição de hidróxi aromático (com base em uma comparação de pontos de ebulição padrão) é 10°C ou maior que o ponto de ebulição padrão do álcool.

Além disso, transesterificação é preferivelmente realizada por um método contínuo para permitir transesterificação prosseguir eficientemente. Isto é, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima e a composição de hidróxi aromático são continuamente fornecidas a um reator, transesterificação é realizada, álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima que é formada é extraído a partir do reator na forma de um componente gasoso, e um líquido de reação contendo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído formado e a composição de hidróxi aromático é continuamente extraída a partir do fundo do reator.

Embora o material do reator e linhas usadas para efetuar transesterificação possa ser materiais conhecidos desde que eles não tenham um efeito prejudicial nas substâncias iniciais e reagentes, materiais tais como SUS304, SUS316 ou SUS316L são baratos e pode ser usado preferivelmente. Aparelhos de processo conhecidos tais como um medidor de fluxo, um termômetro e outros instrumentos de medição ou um refervedor, uma bomba ou um condensador e semelhantes podem ser adicionados como necessário, o método conhecido tal como vapor ou um aquecedor pode ser usado para aquecer, e o método conhecido tal como resfriamento de ar, água ou salmoura de resfriamento pode ser usado para resfriar. Etapas podem também ser adicionadas como necessário. Por exemplo, etapas e aparelhos aptos a serem projetados por uma pessoa ou engenheiro versado na técnica podem ser

adicionados, tais como uma etapa de dissolver o composto hidróxi aromático, uma etapa de separar o álcool, uma etapa de separar e/ou purificar o composto hidróxi aromático, uma etapa de purificar o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir do líquido de reação formado ou uma etapa de incinerar ou descartar subprodutos e semelhantes. Não existem limitações particulares no tipo de reator, e um reator tipo tanque ou um tipo coluna conhecido pode ser usado. Vários métodos conhecidos são usados para tal reator, exemplos dos quais podem incluir tipo usando reatores contendo um tanque de agitação, um tanque de agitação de estágios múltiplos, uma coluna de destilação, uma coluna de destilação de estágios múltiplos, um reator multitubular, uma coluna de destilação de estágios múltiplos contínua, uma coluna recheada, um evaporador de película fina, um reator provido com suporte dentro, um reator de circulação forçada, um evaporador de película descendente, um evaporador descendente, um reator de fluxo de gotejamento ou uma coluna de borbulhamento, e tipo usando combinações destes. Métodos usando um evaporador de película fina ou um reator tipo coluna são preferíveis do ponto de vista de eficientemente deslocar o equilíbrio para o lado dos produtos, enquanto uma estrutura tendo uma área de contato de gás-líquido grande é preferível para estar apto a rapidamente transferir o álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima formado para a fase gasosa.

A coluna de destilação de estágios múltiplos refere-se a uma coluna de destilação tendo estágios múltiplos em que o número de placas teóricas de destilação é 2 ou mais, e qualquer coluna de destilação de estágios múltiplos pode ser utilizada desde que permita destilação contínua. Qualquer coluna de destilação de estágios múltiplos pode ser usada para a coluna de destilação de estágios múltiplos desde que seja comumente usada como uma coluna de destilação de estágios múltiplos, exemplos dos quais podem incluir tipo coluna de bandeja usando uma bandeja tal como uma bandeja de

borbulhamento, uma bandeja de placa porosa, uma bandeja de válvula ou uma bandeja contra corrente, e coluna recheada tipo recheada com vários tipos de materiais de recheio tais como um anel de Raschig, um anel de Lessing, um anel de polo, a sela de Berl, sela intertrava, um recheio de Dixon, um recheio de McMahon, um Helipack, recheio de Sulzer ou Mellapak. Qualquer coluna recheada pode ser usada desde que a coluna seja recheada com material de recheio conhecido como descrito acima. Ademais, uma combinação tipo bandeja-coluna recheada é também usada preferivelmente que combina uma porção de bandeja com uma porção recheada com um material de recheio.

Uma linha para alimentar gás inerte e/ou solvente inerte líquido a partir da menor porção do reator pode ser separadamente fixada, e no caso a mistura do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído alvo e composto hidróxi aromático contém O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima, uma linha pode ser fixada para circular novamente toda ou uma porção da mistura para o reator. Além disso, no caso de usar o solvente inerte mencionado acima, o solvente inerte pode estar na forma de um gás e/ou um líquido.

O componente gasoso extraído a partir do reator contendo álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído de matéria prima é preferivelmente purificado usando o método conhecido tal como eles que usa uma coluna de destilação, e pode ser reutilizado como um álcool de etapa (A) e/ou etapa (R).

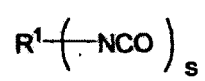
O seguinte provê uma explicação de etapa (F) para obter isocianato termicamente decompondo um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido nas vias mencionadas acima 1) a 5).

<Etapa (F): etapa de obter Isocianato por reação de decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído>

Etapa (F) é um método para obter isocianato representado pela

seguinte fórmula (6), derivado de um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, e uma composição de hidróxi aromático termicamente decompondo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em uma etapa (F) seguinte.

Etapa (F): uma etapa de obter um isocianato e composição de hidróxi aromático a partir de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído:



(6)

(em que

R^1 representa um grupo orgânico que tem um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, e que é substituído com número s de grupos NCO, e s representa um inteiro de 1 a 10).

O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído produzido de acordo com o método descrito acima é preferivelmente usado para produzir isocianato. O seguinte provê uma explicação de uma etapa de produzir isocianato aplicando o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído para uma reação de decomposição térmica (a ser referida como etapa (F)).

Embora um solvente possa ou não possa na etapa (F), é preferivelmente realizada na presença de uma composição de hidróxi aromático. Uma vez que uma composição de hidróxi aromático é usado em vias 1), 3) e 5) quando realizando etapa (B) ou etapa (P), etapa (F) pode ser realizada usando o líquido de reação obtido naquelas etapas, ou etapa (F) pode ser realizada ajustando a quantidade de composição de hidróxi aromático se necessário. Alternativamente, uma vez que uma composição de hidróxi aromático é usada em etapa (C) de vias 2) e 4), etapa (F) pode ser realizada reutilizando a composição de hidróxi aromático separada, a quantidade de composição de hidróxi aromático usada pode ser ajustada, ou uma composição de hidróxi aromático pode ser recém preparada e usada. O solvente usado em etapa (C)

pode ser separado a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído ou pode ser usado com a composição de hidróxi aromático.

Embora ajuste da quantidade de composição de hidróxi aromático ou a preparação de uma nova composição de hidróxi aromático foram descritas acima, a quantidade destas é tal que a razão do número de compostos hidróxi aromático na composição de hidróxi aromático para o número total de grupos éster do -O-aril éster contido no O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é a partir de 0,2 a 50, preferivelmente de 0,3 a 30 e mais preferivelmente de 1 a 20 em consideração de eficiência de transferência do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e tamanho do tanque de armazenamento durante armazenamento. Exemplos de outros solventes que podem ser adicionados podem incluir solventes inertes adequados para o propósito de facilitar o procedimento de reação e semelhantes, incluindo alcanos tais como hexano (incluindo isômeros), heptano (incluindo isômeros), octano (incluindo isômeros), nonano (incluindo isômeros) ou decano (incluindo isômeros); hidrocarbonetos aromáticos e hidrocarbonetos aromáticos substituídos de alquila tais como benzeno, tolueno, xileno (incluindo isômeros), etil benzeno, diisopropil benzeno (incluindo isômeros), dibutil benzeno (incluindo isômeros) ou naftaleno; compostos aromáticos substituídos com um grupo halogênio ou nitro tais como clorobenzeno, diclorobenzeno (incluindo isômeros), bromobenzeno, dibromobenzeno (incluindo isômeros), cloronaftaleno, bromonaftaleno, nitrobenzeno ou nitronaftaleno; compostos de hidrocarboneto policíclico tais como difenila, difenila substituída, difenil metano, terfenila, antraceno ou dibenzil tolueno (incluindo isômeros); hidrocarbonetos alifáticos tais como ciclo-hexano, ciclopentano, ciclooctano ou etilciclo-hexano; cetonas tais como metil etil cetona ou acetofenona; e ftalato de dibutila, dihexila ftalato ou ftalato de dioctila.

A temperatura de reação da reação de decomposição térmica

realizada em etapa (F) está geralmente dentro de uma faixa de 100 a 300°C, e embora a temperatura elevada seja preferível para aumentar a taxa de reação, uma vez que reações laterais como previamente descritas podem ser induzidas pelo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e/ou produto na forma de isocianato em elevadas temperaturas, a temperatura de reação está preferivelmente dentro de uma faixa de 150 a 250°C. O aparelho de resfriamento conhecido ou aparelho de aquecimento pode ser instalado no reator para manter uma temperatura de reação constante. Além disso, embora variando de acordo com os tipos de compostos usados e a temperatura de reação, a reação pode ser realizada em pressão reduzida, pressão normal ou pressão aumentada e normalmente em uma pressão de reação dentro de uma faixa de 20 a 1 x 10^6 Pa. Não existem limitações particulares no tempo de reação (tempo de residência no caso de um método contínuo), e é geralmente de 0,001 a 100 horas, preferivelmente de 0,005 a 50 horas e mais preferivelmente de 0,01 a 10 horas.

Embora um catalisador não seja preferivelmente usado na presente forma de realização, no caso de usar um catalisador em quaisquer das etapas quando produzindo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, o resíduo de catalisador pode ser alimentado à etapa de decomposição térmica, embora a presença de tal resíduo de catalisador não apresente um problema.

No caso de ter armazenado um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em uma temperatura elevada por um longo período de tempo, há casos em que reações laterais ocorrem tais como uma reação pela qual compostos contendo ligação uréia são formados por uma reação de descarboxilação de éster de duas moléculas de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, ou uma reação pela qual os grupos alofanato são formados por uma reação com isocianato formada por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Deste modo, a quantidade de vez durante

que o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e o isocianato são mantidas em uma temperatura elevada é preferivelmente tão curta quanto possível. Deste modo, a reação de decomposição térmica é preferivelmente realizada na forma do método contínuo. O método contínuo refere-se a um método em que uma mistura contendo o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é continuamente fornecido a um reator em que é submetido a uma reação de decomposição térmica, e o isocianato e composto hidróxi aromático formado são continuamente extraída a partir do reator de decomposição térmica. Neste método contínuo, componentes de ponto de ebulição baixo formados por decomposição térmica de uretano são preferivelmente recuperados a partir da porção superior do reator de decomposição térmica na forma de componente de fase gasosa, enquanto o restante é recuperado a partir do fundo do reator de decomposição térmica na forma de componentes de fase líquida. Embora todos compostos presentes no reator de decomposição térmica possam ser recuperados como componentes de fase gasosa, a presença de componentes de fase líquida no reator de decomposição térmica tem o efeito de dissolver substâncias poliméricas formadas por reações laterais causadas pelo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e/ou isocianato, assim prevenindo adesão e solidificação das substâncias poliméricas no reator de decomposição térmica. Embora isocianato e composto hidróxi aromático sejam formados por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, pelo menos um destes compostos é recuperado na forma de um componente de fase gasosa. Que composto é recuperado como um componente de fase gasosa é dependente de tais fatores como as condições da reação de decomposição térmica.

Aqui, embora o termo "componente de ponto de ebulição baixo formado por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído " usado na presente forma de realização é equivalente ao

composto hidróxi aromático e/ou isocianato formadas por decomposição térmica do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, particularmente refere-se a um composto que é apto a estar presente como um gás sob as condições em que a reação de decomposição térmica é realizada.

Por exemplo, um método pode ser empregado em que o isocianato e composto hidróxi aromático formados pela reação de decomposição térmica podem ser recuperados na forma de componentes de fase gasosa, enquanto um componente de fase líquida é recuperado que contém O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. Neste método, o isocianato e composto hidróxi aromático pode ser recuperado separadamente no reator de decomposição térmica. O componente de fase gasosa recuperado que contém isocianato é preferivelmente fornecido a um aparelho de destilação para separar e purificar o isocianato na fase gasosa. Embora o componente de fase gasosa recuperado que contém isocianato pode ser fornecido a um aparelho de destilação após converter para uma fase líquida com um condensador e semelhantes, existem muitos casos em que o aparelho torna-se complexo e a quantidade de energia usada torna-se grande, assim tornando isso indesejável. No caso o componente de fase líquida contém O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, toda ou uma porção da componente de fase líquida é preferivelmente fornecida à porção superior do reator de decomposição térmica em que o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é novamente submetido a uma reação de decomposição térmica. A porção superior do reator de decomposição térmica como referida aqui indica a porção dois ou mais estágios acima do fundo da coluna em termos do número de placas teóricas no caso do reator de decomposição térmica sendo uma coluna de destilação, enquanto no caso o reator de decomposição térmica é um destilador de película fina, indica a porção acima a porção de superfície de transferência aquecida. Quando alimentando todo ou uma porção do componente de fase líquida à porção

superior do reator de decomposição térmica, o componente de fase líquida é transferido enquanto mantendo em uma temperatura de preferivelmente de 50 a 180°C, mais preferivelmente de 70 a 170°C e ainda mais preferivelmente de 100 a 150°C.

Além disso, um método pode também ser empregado em que, por exemplo, o isocianato e composto hidróxi aromático formados pela reação de decomposição térmica são recuperados na forma de componentes de fase gasosa, enquanto um componente de fase líquida contendo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é recuperado a partir do fundo do reator de decomposição térmica. Neste método também, o componente gasoso recuperado que contém isocianato é preferivelmente fornecido a um aparelho de destilação para separar e purificar o isocianato na fase gasosa. Por outro lado, todo ou uma porção do componente de fase líquida que contém O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é alimentado à porção superior do reator de decomposição térmica em que o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é novamente submetido a uma reação de decomposição térmica. Quando alimentando todo ou uma porção do componente de fase líquida à porção superior do reator de decomposição térmica, o componente de fase líquida é transferido enquanto mantendo em uma temperatura de preferivelmente de 50 a 180°C, mais preferivelmente de 70 a 170°C e ainda mais preferivelmente de 100 a 150°C.

Ademais, um método pode também ser empregado em que, por exemplo, o composto hidróxi aromático entre o isocianato e composto hidróxi aromático formados pela reação de decomposição térmica é recuperado na forma de um componente de fase gasosa, enquanto uma mistura contendo o isocianato é recuperado na forma de uma componente de fase líquida a partir do fundo do reator de decomposição térmica. Neste caso, o componente de fase líquida é fornecido a um aparelho de destilação para recuperar o isocianato. No

caso O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído está contido na componente de fase líquida, toda ou uma porção da mistura contendo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é preferivelmente alimentado à porção superior do reator de decomposição térmica e o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é novamente submetido a uma reação de decomposição térmica. Quando alimentando todo ou uma porção do componente de fase líquida ao reator de decomposição térmica, o componente de fase líquida é transferido enquanto mantendo em uma temperatura de preferivelmente de 50 a 180°C, mais preferivelmente de 70 a 170°C e ainda mais preferivelmente de 100 a 150°C.

Embora previamente descrito, na reação de decomposição térmica, o componente de fase líquida é preferivelmente recuperado a partir do fundo do reator de decomposição térmica. Isso é devido à presença de uma componente de fase líquida no reator de decomposição térmica tem o efeito de dissolver substâncias poliméricas formadas por reações laterais causadas pelo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e/ou isocianato como previamente descrito, assim possibilitando as substâncias poliméricas serem descarregadas a partir do reator de decomposição térmica e prevenindo adesão e solidificação das substâncias poliméricas no reator de decomposição térmica.

No caso em que o componente de fase líquida contém O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, embora todo ou uma porção do componente de fase líquida seja alimentado à porção superior do reator de decomposição térmica em que o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é novamente submetido a uma reação de decomposição térmica, subprodutos poliméricos podem acumular na componente de fase líquida se esta etapa é repetida. Neste caso, todo ou uma porção do componente de fase líquida pode ser removido a partir do sistema de reação ou mantido para uma concentração fixada para reduzir acúmulo de subprodutos poliméricos.

Embora não existam limitações particulares no tipo do reator de decomposição térmica, o aparelho de destilação conhecido é usado preferivelmente a fim de eficientemente recuperar componentes de fase gasosa. Vários métodos conhecidos são usados para tal vaso de reação, exemplos dos quais podem incluir tipo usando vaso de reação contendo uma coluna de destilação, uma coluna de destilação de estágios múltiplos, um reator multitubular, uma coluna de destilação de estágios múltiplos contínua, uma coluna recheada, um evaporador de película fina, um reator provido com suporte dentro, um reator de circulação forçada, um evaporador de película descendente ou um evaporador descendente, e tipo usando combinações destes. A partir do ponto de vista de rapidamente remover componentes de ponto de ebulição baixo a partir do sistema de reação, um método usando um reator tubular é preferível, enquanto um método usando um reator tais como um evaporador de película fina tubular ou um evaporador de película descendente tubular é mais preferível, e uma estrutura tendo uma área de contato de gás-líquido grande é preferível para estar apto a rapidamente transferir os componentes de ponto de ebulição baixo formado para a fase gasosa.

Embora o material conhecido possa ser usado para o material do reator de decomposição térmica e linhas providas não têm um efeito prejudicial no uretano ou produtos na forma do composto hidróxi aromático e isocianato, SUS304, SUS316 ou SUS316L são baratos e podem ser usados preferivelmente.

Os compostos hidróxi aromático contidos nos componentes de fase gasosa e/ou componente de fase líquida obtido na reação de decomposição térmica como descrito acima podem cada ser separados, recuperados e reutilizados. Mais especificamente, compostos hidróxi aromático podem ser reutilizados como compostos hidróxi aromático usados em etapa (A) e/ou etapa (A) e/ou etapa (B) e/ou etapa (R) e/ou etapa (P). Em outras palavras, é

preferível que a composição de hidróxi aromático obtida na etapa (F) seja separada a partir de isocianato, e então usada reciclando na etapa (A) e/ou na etapa (B) descrita em via 1), ou na etapa (A) e/ou na etapa (R) e/ou na etapa (P) descritas em via 3).

Além disso, em um aspecto preferível da presente forma de realização, O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído não reagido que não passou por decomposição térmica em etapa (F) é preferivelmente usado reciclando para a etapa (A) e/ou etapa (B) e/ou etapa (R) e/ou etapa (P) e/ou etapa (F) mencionadas acima.

<Limpeza do reator>

Ocorrem casos em que produtos poliméricos de reação lateral podem ser formados, embora em quantidades diminutas, na produção O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e na produção de isocianato usando o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído da presente forma de realização. Uma vez que estes produtos poliméricos de reação lateral têm uma elevada solubilidade com relação a composição de hidróxi aromático usada na presente forma de realização, eles são removidos a partir do reator na forma de uma solução da composição de hidróxi aromático. No entanto, em casos de flutuações em aparelho de reação condições de operação ou casos de operação de longo prazo, os produtos poliméricos de reação lateral podem aderir para o reator.

Em tais casos, o interior (e particularmente as paredes interiores) do reator pode ser limpo com um ácido que é um bom solvente dos produtos poliméricos de reação lateral para manter o interior do reator limpo.

Não existem limitações particulares no ácido de limpeza desde que este dissolva os produtos poliméricos de reação lateral, e embora ambos ácidos orgânicos e ácidos inorgânicos possam ser usados, ácidos orgânicos são usados preferivelmente. Embora exemplos de ácidos orgânicos que podem ser usados

podem incluir ácido carboxílico, ácido sulfônico, ácido sulfínico, fenóis, enóis, tiofenóis, imidas, oximas e sulfonamidas aromáticas, ácido carboxílico e fenóis são usados preferivelmente. Exemplos de tais compostos podem incluir compostos de ácido monocarboxílico saturados ou insaturados tais como ácido fórmico, ácido acético, ácido propiônico, ácido n-butírico, ácido isobutírico, ácido valérico, ácido isovalérico, ácido 2-metilbutanóico, ácido piválico, ácido hexanóico, ácido isocapróico, ácido 2-etilbutanóico, ácido 2,2-dimetilbutanóico, ácido heptanóico (incluindo isômeros), ácido octanóico(incluindo isômeros), ácido nonanóico(incluindo isômeros), ácido decanóico(incluindo isômeros), ácido undecanóico(incluindo isômeros), ácido dodecanóico(incluindo isômeros), ácido tetradecanóico(incluindo isômeros), ácido hexadecanóico(incluindo isômeros), ácido acrílico, ácido crótico, ácido isocrótico, ácido vinilacético, ácido metacrílico, ácido angélico, ácido tíglico, acetato de arila ou ácido undecenóico (incluindo isômeros); ácidos dicarboxílicos alifáticos saturados ou insaturados tais como ácido oxálico, ácido malonic, ácido succínico, ácido glutárico, ácido adípico, ácido heptanodióico (incluindo isômeros), ácido octanodióico (incluindo isômeros), ácido nonanodióico (incluindo isômeros), ácido decanodióico (incluindo isômeros), ácido maléico, ácido fumárico, ácido metilmaléico, ácido metilfumárico, ácido pentenedióico (incluindo isômeros), ácido itacônico ou alilmalônico; compostos de acido tricarboxílico saturados ou insaturados tais como ácido 1,2,3-propanotricarboxílico, ácido 1,2,3-propenetricarboxílico ou ácido 2,3-dimetilbutano-1,2,3-tricarboxílico; compostos de ácido carboxílico aromáticos tais como ácido benzóico, ácido metilbenzóico (incluindo isômeros), ácido etilbenzóico (incluindo isômeros), ácido propilbenzóico (incluindo isômeros), ácido dimetilbenzóico (incluindo isômeros) ou trimetilbenzóico (incluindo isômeros); compostos de ácido dicarboxílico aromático tais como ácido ftálico, ácido isoftálico, ácido tereftálico ou ácido metilisoftálico;

compostos de ácido tricarboxílico aromáticos tais como ácido hemimelítico, ácido trimelítico ou ácido trimésico; fenol; fenóis mono-substituídos tais como metil fenol (incluindo isômeros), etil fenol (incluindo isômeros), propil fenol (incluindo isômeros), butil fenol (incluindo isômeros), pentil fenol (incluindo isômeros), hexil fenol (incluindo isômeros), heptil fenol (incluindo isômeros), octil fenol (incluindo isômeros), nonil fenol (incluindo isômeros), decil fenol (incluindo isômeros), dodecil fenol (incluindo isômeros), fenil fenol (incluindo isômeros), fenoxifenol (incluindo isômeros) ou cumil fenol (incluindo isômeros); e dimetil fenol (incluindo isômeros), dietil fenol (incluindo isômeros), dipropil fenol (incluindo isômeros), dibutil fenol (incluindo isômeros), dipentil fenol (incluindo isômeros), dihexil fenol (incluindo isômeros), diheptil fenol (incluindo isômeros), dioctil fenol (incluindo isômeros), dinonil fenol (incluindo isômeros), didecil fenol (incluindo isômeros), didodecil fenol (incluindo isômeros), difenil fenol (incluindo isômeros), difenoxifenol (incluindo isômeros) ou dicumil fenol (incluindo isômeros). Em consideração de efeitos no caso do solvente de limpeza restante após limpar o reator de decomposição térmica, mais exemplos preferíveis de estes ácidos orgânicos podem incluir compostos hidróxi aromático, enquanto ainda mais exemplos preferíveis podem incluir compostos do mesmo tipo como compostos hidróxi aromático formado no método de produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e/ou reação de decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído da presente forma de realização.

Além disso, no caso de usar um composto hidróxi aromático para o ácido de limpeza, o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático preferivelmente tem um diferença em ponto de ebulição de 10°C ou mais a partir do ponto de ebulição padrão de isocianato formado pela reação de decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído descrito acima do ponto de vista de efeitos de limpeza.

Vários métodos podem ser usados para limpar o reator usando o solvente de limpeza mencionado acima, exemplos dos quais podem incluir um método em que o reator é limpo introduzindo o solvente de limpeza a partir da porção superior do reator, e um método em que o interior do reator é limpo introduzindo o agente de limpeza no fundo do reator e então fervendo o reagente de limpeza através do reator.

Não é necessário efetuar o procedimento de limpeza cada vez a reação é realizada, mas sim pode ser determinado arbitrariamente baseado nos compostos usados, taxa de operação e semelhantes, e o procedimento de limpeza é preferivelmente realizado uma vez a cada 1 a 20000 horas de tempo de operação, mais preferivelmente uma vez a cada dia para um ano de tempo de operação, e ainda mais preferivelmente uma vez a cada mês para um ano de tempo de operação. O reator pode ser equipado com uma linha para introduzir o agente de limpeza.

As etapas (D), (E) e (G) explicadas abaixo são realizadas em adição ao método mencionado acima.

<Etapa (D)>

Uréia é recuperada realizando uma seguinte etapa (D) antes de etapa (B), etapa (R) ou etapa (P) e/ou simultâneo a etapa (B), etapa (R) ou etapa (P):

etapa (D): uma etapa de remover uréia por destilação ou sublimação.

Quando produzindo o composto tendo os grupos ureído como descrito em etapa (A), uréia é preferivelmente usada em excesso baseada na amina primária orgânica. Nesta vez, uma vez que compostos tendo grupos ureileno podem ser formados como subprodutos no caso um quantidade de excesso de uréia não reagida está presente em etapa (B), etapa (R) ou etapa (P) enquanto ainda contendo um excesso de uréia, a uréia é separada por destilação

ou sublimação. O método conhecido pode ser usado para o método de separação, e embora variando de acordo com os compostos usados, um método tais como filtração, destilação ou sublimação pode ser usado. Um método que é realizado simultâneo a etapa (B), etapa (R) ou etapa (P) é preferível.

Isto é, na reação realizada em etapa (B), etapa (R) ou etapa (P), um gás contendo uma composição de hidróxi (a composição de hidróxi refere-se a uma composição contendo pelo menos um tipo de composição de hidróxi aromático e/ou composto hidróxi aromático e/ou álcool), composto tendo grupos carbonila derivados de uréia e amônia formada como um subproduto na reação é introduzido em um condensador provido no reator, e toda ou uma porção da composição de hidróxi e o composto tendo grupos carbonila derivados de uréia são condensados.

Nesta vez, a composição de hidróxi condensada é preferivelmente presente em uma razão estequiométrica de 1 ou mais baseada na uréia condensada e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia.

Na presente forma de realização, um "composto tendo grupos carbonila derivados de uréia" que é condensado no condensador inclui compostos tendo grupos carbonila derivados de uréia usados na reação com amina orgânica, uréia e composição hidróxi, a uréia por si só usada como uma matéria prima (incluindo uréia não reagida e/ou a porção de excesso no caso de ter sido usado em excesso com base em amina orgânica), compostos obtidos pela reação entre a uréia e a composição hidróxi, e compostos obtidos por uma reação entre tipos iguais ou diferentes de derivados de ácido carbônico. Embora seja difícil identificar todos os compostos tendo grupos carbonila derivados de uréia, exemplos específicos podem incluir ácido isociânico, uréia, uréia compostos tais como biuretos ou nuratos, O-ésteres de ácido carbâmico não N-substituído em que os grupos éster são grupos derivado da composição hidróxi, e ésteres de ácido carbônico em que os grupos éster são grupos

derivados da composição hidróxi. Compostos tendo grupos carbonila derivados de um derivado de ácido carbônico podem ser quantificados pelo método que detecta grupos carbonila contidos no composto tais como espectroscopia de infravermelho, espectroscopia de infravermelho contígua, espectroscopia Raman ou espectroscopia de ultravioleta, ou por um método que especificamente analisa compostos formados tais como cromatografia de gás, cromatografia líquida ou RMN. Muitos destes compostos tendo grupos carbonila derivados de uréia têm um elevado ponto de fusão e tendem a precipitar facilmente. Entre os compostos mencionados acima tendo grupos carbonila derivados de uréia, uréia em particular requer o maior cuidado uma vez que é formada em grandes quantidades (quantidades detectadas) e tem um ponto de fusão de 135°C.

Como um resultado de levar a razão estequiométrica da composição de hidróxi condensada a ser 1 ou mais com base no composto condensado tendo grupos carbonila derivados da uréia no procedimento de condensação, a mistura destes pode ser obtida na forma de uma mistura líquida homogênea no condensador. Deste modo, não apenas faz isso facilitar o manuseio da mistura, mas é também possível evitar a ocorrência de problemas tais como adesão e acúmulo de componentes sólidos no condensador. Além disso, como será descrito mais tarde, isso é também efetivo para reduzir a quantidade de compostos tendo grupos carbonila derivados da uréia contidos em amônia recuperada a partir do condensador para igual a ou menor que uma quantidade específica. A quantidade da composição de hidróxi condensada baseada no composto condensado tendo grupos carbonila derivados da uréia em termos da razão estequiométrica é mais preferivelmente 2 ou mais e ainda mais preferivelmente 3 ou mais. A fim de assegurar que a quantidade da composição de hidróxi condensada baseada no composto condensado tendo grupos carbonila derivados da uréia é dentro das faixas acima, o condensador é

preferivelmente mantido em uma temperatura pelo menos 90°C menor que o ponto de ebulição padrão da composição hidróxi.

<Método de Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído usando uma composição de hidróxi aromático contendo uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi aromático>

Um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído pode ser produzido nas etapas 1) a 5) mencionadas acima usando uma composição de hidróxi aromático contendo uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi aromático.

Além disso, no caso de realizar etapa (D) em via 1) ou via 2), um gás contendo a composição de hidróxi aromático, uréia e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia é condensado em um condensador a fim de recuperar a uréia e composto tendo grupos carbonila derivados de uréia na forma de uma solução homogênea. Consequentemente, a composição de hidróxi aromático preferivelmente contém um composto hidróxi aromático que é facilmente vaporizado para certo grau sob as condições de reação. Por outro lado, uma vez que o composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático principalmente reage na fase líquida para formar O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, a composição de hidróxi aromático preferivelmente contém um composto hidróxi aromático que está presente como um líquido sob as condições de reação. Deste modo, uma composição de hidróxi aromático que contém uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi aromático tendo diferentes pontos de ebulição padrão podem ser preferivelmente usados para a composição de hidróxi aromático.

Neste caso, existem muitos casos em que, quando todos da pluralidade de tipo de compostos hidróxi aromático tendo diferentes pontos de ebulição padrão formam éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo com o composto tendo grupos ureído, uma pluralidade de tipos de compostos

hidróxi aromático são formados junto com isocianato durante produção de isocianato por decomposição térmica do éster de ácido carbâmico N-substituído, assim fazendo separação dos compostos hidróxi aromático complexa. Portanto, um método para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído tendo grupos éster derivado de um composto hidróxi aromático ativo com elevada seletividade é preferivelmente realizada usando uma combinação de um composto hidróxi aromático ativo e um composto hidróxi aromático inativo. Ademais, se compostos hidróxi aromático são selecionados tal que o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático ativo é o maior na composição de hidróxi aromático, a concentração do composto hidróxi aromático ativo aumenta na fase líquida em que a formação reação do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído principalmente ocorre, assim tornando possível formar um O-éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto hidróxi aromático ativo com maior seletividade. Um composto hidróxi aromático inativo tendo um ponto de ebulição padrão menor que o ponto de ebulição padrão do composto hidróxi aromático ativo é preferivelmente introduzido no condensador na forma de um componente de fase gasosa e condensado no condensador junto com o composto tendo grupos carbonila derivados do derivado de ácido carbônico.

FIG. 7 mostra um desenho conceitual de um método de produção de éster de ácido carbâmico N-substituído que usa uma composição de hidróxi aromático composta de uma pluralidade de tipos de compostos hidróxi aromático como descrito acima (aqui, para o objetivo de simplificada da explicação, uma composição de hidróxi aromático é descrita que contém dois tipos de compostos hidróxi aromático contendo um composto hidróxi aromático ativo e um composto hidróxi aromático inativo).

Um exemplo deste tipo de composto hidróxi aromático ativo é um composto hidróxi aromático representado por fórmula (32), e preferivelmente

um composto hidróxi aromático representado por fórmula (38). Além disso, um exemplo de um composto hidróxi aromático inativo é um composto hidróxi aromático representado por fórmula (39), e mais preferivelmente um composto hidróxi aromático representado por fórmula (40). Embora seja difícil geralmente definir separabilidade, com base na descoberta que geralmente dois componentes a serem separados podem ser adequadamente separados por destilação industrialmente se os pontos de ebulição padrão destes são 10°C ou maior, a diferença entre os pontos de ebulição padrão do composto hidróxi aromático ativo e o composto hidróxi aromático inativo é preferivelmente tal que o composto tendo o maior ponto de ebulição padrão é um composto hidróxi aromático ativo, enquanto o composto tendo o menor ponto de ebulição padrão é um composto hidróxi aromático inativo, e é preferivelmente selecionado tal que o ponto de ebulição padrão é 10°C ou maior, e mais preferivelmente 20°C ou maior, com base no composto tendo o maior ponto de ebulição, e é também selecionado em consideração da diferença com o ponto de ebulição padrão do isocianato formado como previamente descrito. Neste caso, um composto hidróxi aromático ativo é selecionado tendo um ponto de ebulição padrão que é 10°C ou mais além a partir daquele do isocianato formado. No caso de usar um composto hidróxi aromático tendo um ponto de ebulição padrão maior que aquele de isocianato, um composto hidróxi aromático ativo é selecionado que tem um ponto de ebulição padrão 10°C ou maior que aquele do isocianato, e no caso de usar um composto hidróxi aromático tendo um ponto de ebulição padrão menor que aquele de isocianato, um composto hidróxi aromático ativo é selecionado que tem um ponto de ebulição padrão 10°C ou maior que aquele do isocianato.

<Etapa (E)>

Etapa (E): uma etapa de reciclar uréia recuperada em etapa (D) a etapa (A).

Etapa (E) é uma etapa de reciclar uréia recuperada em etapa (D) como descrito acima para etapa (A). O uso de reciclar é preferível uma vez que permite a quantidade de uréia usada a ser reduzida. Em etapa (E), a mistura recuperada em etapa (D) pode ser reciclada diretamente para etapa (A) ou apenas a uréia pode ser reciclada. Componentes a serem reciclados podem ser separados como necessário ou componentes podem ser adicionadas antes de reciclar para etapa (A). Separação e adição podem ser efetuadas usando métodos conhecidos, e a uréia, composto tendo grupos carbonila derivados de uréia e composição de hidróxi e semelhantes são analisados e então adequadamente reciclados.

<Etapa (G)>

A seguinte etapa (G) é realizada para recuperar amônia formada como um subproduto em etapa (A) e/ou etapa (B) e/ou etapa (R) e reage a amônia com dióxido de carbono para regenerar uréia seguido por reciclar a uréia para etapa (A):

Etapa (G): uma etapa de recuperar amônia formada como um subproduto, regenerar uréia reagindo a amônia com dióxido de carbono, e reciclar uma uréia para etapa (A).

Na presente forma de realização, amônia descarregada a partir do condensador na etapa (A), etapa (B) e/ou etapa (R) mencionadas acima absorve água resultando na formação de amônia aquosa, e embora isso possa ser usado em refrigerantes de refrigeradores de absorção de amônia, limpadores de óleos de têxteis, coagulantes de borracha crua, produção de vários tipos de sais de amônia, tratamento de óxidos de nitrogênio gerados por plantas de potência termoelétrica e semelhantes ou produção de emulsões fotográficas e assim por diante, ou podem ser usados na forma de amônia líquida empregando um método tais como separação de resfriamento profundo em tais aplicações como matérias primas de fertilizantes de nitrogênio, matérias primas de fibras

sintéticas (tais como caprolactama ou acrilonitrila), tratamento de geração de óxidos de nitrogênio por plantas de potência termoelétrica e semelhantes ou refrigerantes, é preferivelmente usado para sintetizar uréia. O seguinte provê uma explicação desta etapa de síntese de uréia (a ser referida como etapa (G)).

O método convencionalmente conhecido pode ser empregado para produzir uréia reagindo amônia e dióxido de carbono, um exemplo de que pode incluir reagir amônia e dióxido de carbono em uma pressão dentro de uma faixa de 20 a 40 MPa e temperatura dentro de uma faixa de 190 a 200°C tal que a razão de amônia para dióxido de carbono está dentro de uma faixa de uma razão estequiométrica de 3 a 5.

A uréia produzida por tal método pode ser usada na reação de etapa (A).

Embora o seguinte indique um exemplo de um aspecto preferível que combina o método mencionado acima, não existem limitações particulares em outros aspectos desde que eles sejam baseados no método mencionado acima. Etapas adicionais (tais como etapas (D), (E), (F) ou (G)) podem não ser realizada ou etapas adicionais podem ser adequadamente selecionadas e efetuadas. Etapa (F) é realizada quando produzindo isocianato a partir de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído. No seguinte aspecto, uma composição de hidróxi refere-se a uma composição contendo pelo menos um tipo de componente selecionado dentre uma composição de hidróxi aromático e/ou composto hidróxi aromático e/ou álcool. No caso de acúmulo de um subproduto é observado em cada etapa, o subproduto é preferivelmente adequadamente removido para fora do sistema a partir da composição reciclada ou junto com a composição reciclada, e pode ser removido usando o método conhecido. O método de remoção pode ser adequadamente determinado por uma pessoa versada na técnica. Exemplos de métodos que podem ser usados podem incluir um método para parcialmente remover um componente de fase

líquida e/ou componente de fase gasosa para fora do sistema, e um método para remover um componente sólido por filtração e semelhantes.

FIG. 8 mostra um desenho conceitual descrevendo um aspecto da presente forma de realização que combina via 1) com etapas (D), (E), (F) e (G).

Primeiro, o composto tendo os grupos ureído é produzido em etapa (A) reagindo a amina primária orgânica e uréia. Nesta etapa (A), a composição de hidróxi aromático age principalmente como um solvente de reação. Na reação de etapa (A), amônia formada como um subproduto pode ser extraído a partir do líquido de reação até a concentração de amônia no líquido de reação está dentro das faixas preferíveis previamente descritas. O líquido de reação obtido em etapa (A) contém composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático, e o líquido de reação pode ser uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído da presente forma de realização dependendo das matérias primas usadas, razão composta das matérias primas, condições de reação de etapa (A) e semelhantes. Na subsequente etapa (B), O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído é produzido reagindo o composto tendo grupos ureído e um composto hidróxi aromático. Amônia formada como um subproduto na reação desta etapa (B) é extraída a partir do líquido de reação até a concentração de amônia é dentro das faixas preferíveis previamente descritas, e é usado em etapa (G) junto com a amônia extraída em etapa (A). A uréia produzida em etapa (G) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A). Além disso, etapa (D) é realizada simultânea à etapa (B). Isto é, uréia não reagida ou de excesso é removida por destilação ou sublimação. Nesta vez, a uréia é destilada junto com uma porção da composição de hidróxi aromático, e é preferivelmente removida e recuperada na forma de uma mistura com a composição de hidróxi aromático. A uréia recuperada em etapa (D) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A) realizando etapa (E).

O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (B) é submetido à decomposição térmica na subsequente etapa (F), resultando na formação do correspondente isocianato e composição de hidróxi aromático. A composição de hidróxi aromático separada a partir do isocianato em etapa (F) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A).

FIG. 9 mostra um desenho conceitual descrevendo um aspecto da presente forma de realização que combina via 2) com etapas (D), (E), (F) e (G).

Esta via 2) é um exemplo de um aspecto preferível no caso de usar uma monoaril amina para a amina primária orgânica.

Primeiro, amina primária orgânica (monoaril amina) e uréia são reagidas em etapa (A) para produzir o composto tendo os grupos ureído. Nesta etapa (A), a composição de hidróxi aromático age principalmente como um solvente de reação. Na reação de etapa (A), amônia formada como um subproduto pode ser extraída a partir do líquido de reação até a concentração de amônia no líquido de reação está dentro das faixas preferíveis previamente descritas. O líquido de reação obtido em etapa (A) contém o composto tendo os grupos ureído e a composição de hidróxi aromático, e o líquido de reação pode ser uma composição para transferência e armazenamento do composto tendo os grupos ureído da presente forma de realização dependendo das matérias primas usadas, razão composta das matérias primas, condições de reação de etapa (A) e semelhantes. Na subsequente etapa (B), O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído é produzido reagindo o composto tendo os grupos ureído e o composto hidróxi aromático. Amônia formada como um subproduto na reação desta etapa (B) é extraído a partir do líquido de reação até a concentração de amônia estar dentro das faixas preferíveis previamente descritas, e é usada em etapa (G) junto com a amônia extraída em etapa (A). A uréia produzida em etapa (G) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A). Além disso, etapa (D) é realizada simultânea à etapa (B). Isto é, uréia não

reagida ou de excesso é removida por destilação ou sublimação. Nesta vez, a uréia é destilada junto com uma porção da composição de hidróxi aromático, e é preferivelmente removida e recuperada na forma de uma mistura com a composição de hidróxi aromático. A uréia recuperada em etapa (D) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A) realizando etapa (E).

O O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído obtido em etapa (B) é usado para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído são reticuladas com grupos metileno ($-CH_2-$) por reticulação com os grupos metileno na subsequente etapa (C). Quando realizando uma etapa (C), a composição de hidróxi aromático usada em etapa (B) é separada a partir do líquido de reação contendo O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído. Após realizando etapa (C), composição de hidróxi aromático é preferivelmente adicionada ao O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído resultante para submeter o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído para uma reação de decomposição térmica em etapa (F). Em etapa (F), o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (C) é submetido a decomposição térmica para formar o correspondente isocianato e uma composição de hidróxi aromático. A composição de hidróxi aromático separada a partir do isocianato em etapa (F) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A).

FIG. 10 mostra um desenho conceitual descrevendo um aspecto da presente forma de realização que combina via 3) com etapas (D), (E), (F) e (G).

Primeiro, amina primária orgânica e uréia são reagidas em etapa (A) para produzir um composto tendo grupos ureído. Um álcool e/ou composição de hidróxi aromático são preferivelmente usados para o solvente de reação nesta etapa (A). Na reação de etapa (A), amônia formada como um subproduto pode ser extraída a partir do líquido de reação até a concentração de

amônia no líquido de reação estar dentro das faixas preferíveis previamente descritas. Uma porção de uréia não reagida ou de excesso pode ser extraída como um componente de fase gasosa nesta vez. O líquido de reação obtido em etapa (A) pode ser uma composição para transferência e armazenamento do composto tendo os grupos ureído da presente forma de realização dependendo das matérias primas usadas, razão composta das matérias primas, condições de reação de etapa (A) e semelhantes. Na subsequente etapa (R), O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído é produzido reagindo o composto tendo os grupos ureído e álcool. Amônia formada como um subproduto na reação desta etapa (R) é extraído a partir do líquido de reação até a concentração de amônia estar dentro das faixas preferíveis previamente descritas, e é usada em etapa (G) junto com a amônia extraída em etapa (A). A uréia produzida em etapa (G) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A). Além disso, etapa (D) é realizada simultânea à etapa (R). Isto é, uréia não reagida ou de excesso é removida por destilação ou sublimação. Nesta vez, a uréia é destilada junto com uma porção da composição de hidróxi aromático (álcool e/ou composição de hidróxi aromático), e é preferivelmente removida e recuperada na forma de uma mistura com a composição de hidróxi aromático. A uréia recuperada em etapa (D) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A) realizando etapa (E).

Em seguida, o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) é convertido para O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo com uma composição de hidróxi aromático em etapa (P). Álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído que é produzido como um subproduto por esta reação é reutilizada em etapa (A). Além disso, no caso remoção de uréia é inadequada em etapa (D) que é realizada simultânea a etapa (R), etapa (D) pode também ser realizada simultânea a etapa (P) para remover uréia no líquido de reação. A uréia recuperada na etapa (D) é também

reutilizada como uma matéria prima de etapa (A) similarmente realizando etapa (E).

O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (P) é submetido a uma reação de decomposição térmica na subsequente etapa (F) para formar o correspondente isocianato e uma composição de hidróxi aromático. A composição de hidróxi aromático separada a partir do isocianato em etapa (F) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A).

FIG. 11 mostra um desenho conceitual descrevendo um aspecto da presente forma de realização que combina via 4) com etapas (D), (E), (F) e (G).

Esta via 4) é um exemplo de um aspecto preferível no caso de usar uma monoaril amina para a amina primária orgânica.

Primeiro, amina primária orgânica (monoaril amina) e uréia são reagidas em etapa (A) para produzir o composto tendo os grupos ureído. Nesta etapa (A), um álcool e/ou composição de hidróxi aromático são preferivelmente usados para o solvente de reação. Na reação de etapa (A), amônia formada como um subproduto pode ser extraído a partir do líquido de reação até a concentração de amônia no líquido de reação estar dentro das faixas preferíveis previamente descritas. Nesta vez, uma porção da uréia não reagida ou de excesso pode também ser extraído como um componente de fase gasosa. O líquido de reação obtido em etapa (A) pode ser uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído da presente forma de realização dependendo das matérias primas usadas, razão composta das matérias primas, condições de reação de etapa (A) e semelhantes. Na subsequente etapa (R), O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído é produzido reagindo o composto tendo grupos ureído e álcool. Amônia formada como um subproduto na reação desta etapa (R) é extraído a partir do líquido de reação até a concentração de amônia estar dentro das faixas preferíveis previamente descritas, e é usada em etapa (G) junto com a amônia

extraída em etapa (A). A uréia produzida em etapa (G) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A). Além disso, etapa (D) é realizada simultânea à etapa (R). Isto é, uréia não reagida ou de excesso é removida por destilação ou sublimação. Nesta vez, a uréia é destilada junto com uma porção de uma composição de hidróxi (álcool e/ou composição de hidróxi aromático), e é preferivelmente removida e recuperada na forma de uma mistura com a composição hidróxi. A uréia recuperada em etapa (D) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A) realizando etapa (E).

Em seguida, o O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) é convertido para O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído reagindo com uma composição de hidróxi aromático em etapa (P). Álcool derivado do O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído que é produzido como um subproduto por esta reação é reutilizada em etapa (A). Além disso, no caso remoção de uréia é inadequada em etapa (D) que é realizada simultânea a etapa (R), etapa (D) pode também ser realizada simultânea a etapa (P) para remover uréia no líquido de reação. A uréia recuperada na etapa (D) é também reutilizada como uma matéria prima de etapa (A) similarmente realizando etapa (E).

O O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído obtido em etapa (P) é usado para produzir O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído são reticuladas com grupos metileno ($-CH_2-$) por reticulação com os grupos metileno na subsequente etapa (C). Quando realizando uma etapa (C), composição de hidróxi aromático permanecendo no líquido de reação de etapa (P) é separada a partir do líquido de reação contendo O-mono(aril éster) de ácido carbâmico de N-substituído. Após realizando etapa (C), composição de hidróxi aromático é preferivelmente adicionada ao O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído resultante para submeter o O-aril éster

de ácido carbâmico N-substituído a uma reação de decomposição térmica em etapa (F).

Em etapa (F), o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (C) é submetido à decomposição térmica para formar o correspondente isocianato e uma composição de hidróxi aromático. A composição de hidróxi aromático separada a partir do isocianato em etapa (F) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A).

FIG. 12 mostra um desenho conceitual descrevendo um aspecto da presente forma de realização que combina via 5) com etapas (D), (E), (F) e (G).

Esta via 5) é um exemplo de um aspecto preferível no caso de usar uma monoaril amina para a amina primária orgânica.

Primeiro, amina primária orgânica (monoaril amina) e uréia são reagidas em etapa (A) para produzir o composto tendo os grupos ureído. Nesta etapa (A), um álcool e/ou composição de hidróxi aromático são preferivelmente usados para o solvente de reação. Na reação de etapa (A), amônia formada como um subproduto pode ser extraída a partir do líquido de reação até a concentração de amônia no líquido de reação estar dentro das faixas preferíveis previamente descritas. Nesta vez, uma porção da uréia não reagida ou de excesso pode também ser extraída como um componente de fase gasosa. O líquido de reação obtido em etapa (A) pode ser uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído da presente forma de realização dependendo das matérias primas usadas, razão composta das matérias primas, condições de reação de etapa (A) e semelhantes. Na subsequente etapa (R), O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído é produzido reagindo o composto tendo os grupos ureído e álcool. Amônia formada como um subproduto na reação desta etapa (R) é extraída a partir do líquido de reação até a concentração de amônia estar dentro das faixas preferíveis previamente descritas, e é usado em etapa (G) junto com a amônia

extraída em etapa (A). A uréia produzida em etapa (G) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A). Além disso, etapa (D) é realizada simultânea à etapa (R). Isto é, uréia não reagida ou de excesso é removida por destilação ou sublimação. Nesta vez, a uréia é destilada junto com uma porção de uma composição de hidróxi (álcool e/ou composição de hidróxi aromático), e é preferivelmente removida e recuperada na forma de uma mistura com a composição hidróxi. A uréia recuperada em etapa (D) é reutilizada como uma matéria prima de etapa (A) realizando etapa (E).

Em seguida, o O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (R) é usado para produzir O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com grupos metileno (-CH_2-) por reticulação com os grupos metileno em etapa (C). Quando realizando uma etapa (C), composição de hidróxi aromático permanecendo no líquido de reação de etapa (R) é separada a partir do líquido de reação contendo O-mono(R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído. Além disso, no caso remoção de uréia é inadequada em etapa (D) que é realizada simultânea a etapa (R), etapa (D) pode também ser realizada simultaneamente quando separando composição de hidróxi restante no líquido de reação de etapa (R) a partir do líquido de reação seguido por recuperação de uréia e composição hidróxi. A uréia recuperada e composição de hidróxi são reutilizada as matérias primas de etapa (A) realizando etapa (E).

Após realizar etapa (C), o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído resultante é submetido a uma reação de transesterificação de etapa (P). Álcool derivado do O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído que é formada como um subproduto por esta reação é reutilizada em etapa (A).

O O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído obtido em etapa (P) é submetido a uma reação de decomposição térmica em etapa (F) para

formar o correspondente isocianato e uma composição de hidróxi aromático. A composição de hidróxi aromático separada a partir do isocianato em etapa (F) é reutilizada como a composição de hidróxi aromático de etapa (P).

Exemplos

Embora o seguinte apresente uma explicação detalhada da presente invenção baseada nos exemplos desta, o escopo da presente invenção não é limitado por estes exemplos.

< Métodos analíticos>

1) Análise RMN

Aparelho: sistema JNM-A400 FT-RMN, JEOL Ltd., Japão

(1) Preparação de amostras de análise ^{1}H- e ^{13}C-RMN

Cerca de 0,3 g de solução de amostra foi pesado seguido por adição de cerca de 0,7 g de clorofórmio pesado (99,8%, Aldrich Corp., USA) e 0,05 g de padrão interno na forma de tetrametil estanho (reagente garantido, Wako Pure Chemical Industries, Ltd., Japão) e misturando para uniformidade para obter soluções usadas como amostras de análise RMN.

(2) Análise quantitativa

Análises foram realizadas para cada padrão e análises quantitativas foram realizadas na amostra de análise soluções com base na curva de calibração resultante.

2) Cromatografia líquida

Aparelho: sistema LC-10AT, Shimadzu Corp., Japão

Coluna: Inertsil-ODS, GL Sciences Inc., Japão, duas colunas conectadas em série

Solvente de revelação: Líquido misturado de 5 mmol/L de solução aquosa de acetato de amônio (solução A) e acetonitrila (solução B)

Taxa de fluxo de solvente de revelação: 2 mL/min

Temperatura de coluna: 35°C

Detector: Detector R.I. (refratômetro) e detector PDA (detector de vetor de fotodiodo, medindo faixa de comprimento de onda: 200 a 300 nm)

(1) Amostras de análise de cromatografia líquida

Cerca de 0,1 g de amostra foi pesada seguido pela adição de cerca de 1 g de tetraidrofurano (desidratado, Wako Pure Chemical Industries, Ltd., Japão) e cerca de 0,02 g de padrão interno na forma de 1,1-dietil uréia (Tokyo Chemical Industry Co., Ltd., Japão) e misturando para uniformidade para obter soluções usadas como amostras de análise de cromatografia líquida.

(2) Análise quantitativa

Análises foram efetuadas para cada padrão e análises quantitativas foram efetuadas na amostra de análise soluções com base na curva de calibração resultante.

3) Análise de água

Aparelho: Micro Water Content Analyzer Modelo CA-21, Mitsubishi Chemical Analytech Co., Ltd., Japão

(1) Análise quantitativa

Cerca de 1 g de amostra foi pesado e injetado no micro analisador de teor de água para determinar o teor de água da amostra.

4) Análise de concentrações de amônia em líquidos e sólidos

Aparelho: Cromatógrafo de íon sIC2001 (Tosoh Corp., Japão)

Coluna: SuperIC-CR

Solução de revelação: solução obtida misturando 1 L de água e cerca de 0,25 g de 18-coroa-6 (Wako Pure Chemical Industries, Ltd., Japão) e cerca de 2,1 mL de 2 mol/L de ácido metanossulfônico (Wako Pure Chemical Industries, Ltd., Japão).

(1) Amostras de análise de cromatografia de íon

Cerca de 0,15 g de amostra foi pesado seguido pela adição de cerca de 1 g de tolueno e cerca de 15 g de 2 mmol/L de solução de ácido nítrico

aquosa, misturando bem e permitindo repousar por cerca de 2 horas. A camada aquosa foi então removida e usada como a amostra de análise de cromatografia de íon.

(2) Análise quantitativa

Uma curva de calibração foi preparada usando Cation Mixed Standard II (Kanto Chemical Co., Inc., Japão), e as quantidades de amônia nas soluções de amostra de análise foram quantificadas com base na curva de calibração.

Além disso, os nomes de compostos usados nos seguintes exemplos são explicados usando regras de nomenclatura definidas por IUPAC bem como nomes comuns.

[Exemplo 1]

Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por via 1)

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho usado na FIG. 13 foi usado.

41,84 kg de p-heptil fenol (Schenectady Chemicals, USA) e 3,10 kg de uréia foram misturados em um tanque de armazenamento 101 aquecido a 120°C com uma linha 13 fechada para obter uma mistura para uso como uma composição de hidróxi aromático. A concentração de água na mistura foi cerca de 15 ppm. A mistura foi transferida para um tanque de agitação 103 (com anteparos) aquecido a 120°C. 1,50 kg de amina orgânica na forma de hexametilenodiamina foram então alimentados na taxa de cerca de 20 g/min (taxa de alimentação de amina orgânica) a partir de um tanque de armazenamento 102 no tanque de agitação 103 via uma linha 12 enquanto agitando o tanque de agitação 103. Formação de amônia de uma linha 19 foi confirmada. Após completar a alimentação de hexametilenodiamina, a agitação foi continuada durante cerca de 2 horas e o líquido de reação foi amostrado.

Como um resultado de analisar o líquido de reação por cromatografia líquida, o líquido de reação foi verificado conter 6,3% em peso de um composto tendo grupos ureído na forma de 6-hexametileno diuréia. Além disso, a concentração de amônia na solução foi de 6300 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados. A relação do número de moléculas de p-heptil fenol para o número de grupos ureído no líquido de reação foi de 7,5.

Linha 13 foi aberta e o líquido de reação foi transferido para um tanque de armazenamento 104 via a linha 13.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O aparelho mostrado na FIG. 13 ainda foi usado.

Uma coluna 105 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a 240°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 26kPa. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado de uma linha 14 provida na coluna recheada 105 na taxa de cerca de 1,5 g/min. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentado após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 35,1 kg. O líquido de reação foi recuperado em um tanque de armazenamento 110 através de uma linha 16 provida no fundo da coluna recheada 105. Um componente de fase gasosa foi condensado de uma linha 15 provida no topo da coluna recheada 105 com um condensador 106, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado em um tanque de armazenamento 109 via um separador de gás líquido 108. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 109 foi analisado por ^{1}H-RMN, o componente condensado foi verificado conter uréia e p-heptil fenol. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi de 23,0 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter

N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 97%. O teor de uréia do líquido de reação estava abaixo do limite de detecção. Além disso, N,N'-bis (6-(p-heptilfenoxicarbamino-hexil) uréia não foi detectada. A concentração de amônia do líquido de reação foi de 9,0 ppm.

Por outro lado, a quantidade de mistura recuperada no tanque de armazenamento 109 foi de 13,5 kg. Esta mistura continha um composto hidróxi aromático (p-heptil fenol) e uréia, e o teor do composto hidróxi aromático (p-heptil fenol) na mistura foi de 85,4% em peso, enquanto o teor de uréia foi de 10,2% em peso.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

Um aparelho de destilação de película fina 602 (Kobelco Eco-Solutions Co., Ltd., Japão) tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 220°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,3 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 na etapa (B) foi colocado em um tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1800 g/h via uma linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado em um tanque de armazenamento 603. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 602 através de uma linha 63. Um componente gasoso contendo diisocianato de hexametileno e p-heptil fenol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O componente gasoso foi

introduzido em uma coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. O componente de fase gasosa foi condensado em um condensador 610 via uma linha 69 e recuperado em um tanque de armazenamento 612 através de um separador de gás líquido 611.

Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base na amina orgânica de etapa (A) (hexametileno diamina) foi cerca de 90%. Uma mistura contendo p-heptil fenol foi obtida em um tanque de armazenamento 614.

Etapa (E): Produção de éster de ácido carbâmico N-substituído re-utilizando a mistura obtida no condensador

A concentração de amônia da mistura recuperada no tanque de armazenamento 109 na etapa (B) de exemplo 1 foi de 820 ppm. 12,8 kg de p-heptil fenol e 0,578 kg de uréia foram adicionados à mistura seguido por transferência no tanque de agitação 103 e realização do mesmo método como na etapa (A) usando 0,92 kg de hexametilenodiamina. Uma solução contendo 6,3% em peso de 1,6-hexanodiuréia foi obtida. O mesmo método como na etapa (B) foi realizado usando esta solução em vez da solução de etapa (A). O líquido de reação recuperado em um tanque de armazenamento 610 continha N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 97%.

[Exemplo 2]

Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por via

1)

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho mostrado na FIG. 14 foi usado.

Uma mistura de 1,92 kg de uréia e 11,9 kg de solvente (1-butanol) foi transferida a partir de um tanque de armazenamento 200 para um tanque de agitação 203 aquecido a 120°C com uma linha 23 fechada. 0,930 kg de amina orgânica na forma de hexametilenodiamina foram então alimentados na taxa de cerca de 5 g/min (taxa de alimentação de amina orgânica) a partir de um tanque de armazenamento 201 no tanque de agitação 103 via uma linha 21 enquanto agitando o tanque de agitação 203. Após completar a alimentação de hexametilenodiamina, a agitação foi continuada durante cerca de 1 hora. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida, foi verificado conter 11,2% em peso de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia. Além disso, a concentração de amônia na solução foi de 7500 ppm. A relação de grupos amino não reagidos para grupos ureído foi de 0,001. 23,1 kg de composto hidróxi aromático na forma de p-heptil fenol foram transferidos a partir de um tanque de armazenamento 202 no tanque de agitação 203 seguido por transferência em um tanque de armazenamento 204 após obter uma solução homogênea.

Etapa (D): Separação e recuperação de uréia

O aparelho mostrado na FIG. 14 ainda foi usado. Uma coluna 205 recheada com um recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a cerca de 120°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 10 kPa. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado na coluna recheada 205 na taxa de cerca de 8,2 g/min de uma linha 24 provido na coluna recheada 205. Um componente gasoso foi recuperado de uma linha 25 e após a condensação em um condensador 206, foi recuperado em um tanque de armazenamento 208. O líquido recuperado obtido no tanque de armazenamento 208 foi um líquido misturado contendo 1-butanol e uréia. Um líquido residual recuperado em um

tanque de armazenamento 209 a partir do fundo da coluna recheada 205 via uma linha 26 foi um líquido misturado contendo 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia e p-heptil fenol. A quantidade recuperada do líquido residual foi cerca de 13,5 kg. A concentração de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia no líquido residual foi cerca de 12,0% em peso, e a relação do número de moléculas de p-heptil fenol para o número de grupos ureído foi cerca de 2,9.

Por outro lado, cerca de 9,8 kg da mistura de 1-butanol e uréia foram recuperados no tanque de armazenamento 208. A quantidade de 1-butanol contido na mistura foi de 92,5% em peso enquanto a quantidade de uréia foi de 7,1% em peso.

Etapa (B): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 14 ainda foi usado. Uma coluna 210 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a 250°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 26 kPa. O líquido residual recuperado no tanque de armazenamento 209 na etapa (D) foi alimentado de uma linha 28 provido na coluna recheada 210 na taxa de cerca de 3,8 g/min. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentada após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 8,95 kg. O líquido de reação foi recuperado em um tanque de armazenamento 216 através de uma linha 31 provida no fundo da coluna recheada 210. Um componente de fase gasosa foi extraído de uma linha 29 provido no topo da coluna recheada 210 e condensado com um condensador 211, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado em um tanque de armazenamento 213 via um separador de gás líquido 212 e circulado na coluna recheada 210. Por outro lado, amônia foi descarregada na forma de um componente gasoso de uma linha 31. A amônia foi absorvida em água e recuperada na forma de amônia

aquosa. Quando o líquido de reação recuperado em um tanque de armazenamento 216 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 95%. Além disso, a concentração de amônia no líquido de reação foi de 8,0 ppm.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

O aparelho de destilação de película fina 602 tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 220°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,3 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 na etapa (B) foi colocado no tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1500 g/h via a linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado no tanque de armazenamento 603. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 602 através de uma linha 63. Um componente gasoso contendo diisocianato de hexametileno e p-heptil fenol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O componente gasoso foi introduzido na coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado na coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. O componente de fase gasosa foi condensado no condensador 610 via a linha 69 e recuperado no tanque de

armazenamento 612 através do separador de gás líquido 611.

Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base na amina orgânica (hexametileno diamina) foi cerca de 90%.

Etapa (E): Produção de éster de ácido carbâmico N-substituído re-utilizando a mistura obtida no condensador

A concentração de amônia da mistura recuperada no tanque de armazenamento 109 na etapa (D) de exemplo 2 foi de 550 ppm. 0,962 kg de uréia foram adicionados à mistura (sem adição de solvente) seguido por transferência no tanque de agitação 103 e realizar o mesmo método como na etapa (A) usando 0,930 kg de hexametilenodiamina. Uma solução contendo 14,1% em peso de 1,6-hexano bis-uréia foi obtida. O mesmo método como na etapa (B) foi realizado usando esta solução em vez da solução de etapa (A). O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 610 continha N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 95%.

[Exemplo 3]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho usado na FIG. 13 foi usado.

13,6 kg de 1-butanol como o composto hidróxi e 2,49 kg de uréia foram misturados no tanque de armazenamento 101 aquecido a 120°C com a linha 13 fechadas para obter uma mistura. A mistura foi transferida ao tanque de agitação 103 (com anteparos) aquecido a 120°C. 1,07 kg de amina orgânica na forma de hexametilenodiamina foram então alimentados na taxa de cerca de 20 g/min (taxa de alimentação de amina orgânica) a partir do tanque de armazenamento 102 no tanque de agitação 103 via a linha 12 enquanto

agitando o tanque de agitação 103. Após completar a alimentação de hexametilenodiamina, a agitação foi continuada durante cerca de 2 horas e o líquido de reação foi amostrado. Como um resultado de analisar o líquido de reação por cromatografia líquida, o líquido de reação foi verificado conter 10,9% em peso de um composto tendo grupos ureído na forma de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia. Além disso, a concentração de amônia na solução foi de 4300 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados. 26,6 kg de um composto hidróxi na forma de p-heptil fenol foram adicionados no líquido de reação para obter uma solução homogênea. A relação do número de moléculas de p-heptil fenol para o número de grupos ureído no líquido de reação foi de 7,6. Linha 13 foi aberta e o líquido de reação foi transferido para o tanque de armazenamento 104 via a linha 13.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O aparelho mostrado na FIG. 13 ainda foi usado.

A coluna recheada 105 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a 240°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 50 kPa. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado a partir da linha 14 provido na coluna recheada 105 na taxa de cerca de 3,8 g/min. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentado após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 37,8 kg. O líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 110 através da linha 16 provida no fundo da coluna recheada 105. Um componente de fase gasosa foi condensado a partir da linha 15 provido no topo da coluna recheada 105 com o condensador 106, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado no tanque de armazenamento 109 via o separador de gás líquido 108. A quantidade do componente condensado recuperado no tanque de armazenamento 109 foi

de 13,3 kg, e quando o componente condensado foi analisado por ^{1}H-RMN, o componente condensado foi verificado conter uréia e 1-butanol. O teor de uréia foi de 9,09% em peso e o teor de 1-butanol foi de 89,1% em peso. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 94%. Uréia não foi detectada no líquido de reação. A quantidade de amônia contida no líquido de reação foi de 8,1 ppm.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

O aparelho de destilação de película fina 602 tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 220°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,3 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 na etapa (B) foi colocado no tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1800 g/h via a linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado no tanque de armazenamento 603. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 602 através de uma linha 63. Um componente gasoso contendo diisocianato de hexametileno e p-heptil fenol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O componente gasoso foi introduzido na coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado na coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma

porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. O componente de fase gasosa foi condensado no condensador 610 via a linha 69 e recuperado no tanque de armazenamento 612 através do separador de gás líquido 611.

Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base na amina orgânica (hexametileno diamina) foi cerca de 90%.

[Exemplo 4]

Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por via 2)

Via (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho usado na FIG. 13 foi usado.

43,5 kg de um composto hidróxi aromático na forma de 4-terc-amil fenol e 3,61 kg de uréia foram misturados no tanque de armazenamento 101 aquecido a 80°C com a linha 13 fechada, e a mistura foi transferida ao tanque de agitação 103 aquecido a 80°C. 1,12 kg de anilina foram então alimentados na taxa de cerca de 10 g/min (taxa de alimentação de anilina) a partir do tanque de armazenamento 102 no tanque de agitação 603 via a linha 12 enquanto agitando o tanque de agitação 103. Após completar a alimentação de hexametilenodiamina, a agitação foi continuada durante cerca de 28 horas e o líquido de reação foi amostrado. Como um resultado de analisar o líquido de reação por cromatografia líquida, o líquido de reação foi verificado conter 4,5% em peso de N-feniluréia. A relação do número de moléculas de 4-terc-amil fenol para o número de grupos ureído no líquido de reação foi de 11. A quantidade de amônia contida no líquido de reação foi de 3800 ppm.

Linha 63 foi aberta e o líquido de reação foi transferido para o tanque de armazenamento 604 via a linha 63.

Etapas (B) e (D): Produção de mono (O-aril éster) de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 13 ainda foi usado.

A coluna recheada 105 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a 200°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 8 kPa. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado a partir da linha 14 provido na coluna recheada 105 na taxa de cerca de 1,6 g/min. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentado após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 8,95 kg. O líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 110 através da linha 16 provida no fundo da coluna recheada 105. Um componente de fase gasosa foi introduzido no condensador 106 a partir da linha 15 provido no topo da coluna recheada 105, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado no tanque de armazenamento 109 via o separador de gás líquido 108. Quando o componente condensado recuperado no tanque de armazenamento 109 foi analisado por ^{1}H-RMN, o componente condensado foi verificado conter uréia e 4-terc-amil fenol. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi de 8,72 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter (4-terc-amilfenil) éster de ácido N-fenilcarbâmico, e o rendimento de (4-terc-amilfenil) éster de ácido N-fenilcarbâmico com base em anilina foi cerca de 93%. A quantidade de amônia contida no líquido de reação foi de 5,6 ppm.

Etapa (C): Condensação de mono (-O-aril éster) de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 15 foi usado.

O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110

na etapa (B) foi colocado em um tanque de agitação 408. O tanque de agitação 408 foi aquecido a 160°C e a pressão interna foi configurada a 2 kPa seguido por destilação do composto hidróxi aromático. O composto hidróxi aromático na forma de 4-terc-amil fenol foi condensado em um condensador 405 via uma linha 44 e recuperado em um tanque de armazenamento 407. A seguir, 1,14 kg de metilal (formaldeído dimetil acetal) a partir de um tanque de armazenamento 400, 4,70 kg de nitrobenzol a partir de um tanque de armazenamento 401, e 5,6 kg de ácido sulfúrico a partir de um tanque de armazenamento 402 foram adicionados no tanque de agitação 408 seguido por aquecimento durante 10 horas a 100°C enquanto agitando o tanque de agitação 408. O solvente e as substâncias não reagidas foram então destiladas mantendo a temperatura interna no tanque de agitação 408 a 100°C e reduzir a pressão interna para 1 kPa. Quando o composto resultante foi analisado por cromatografia líquida, foi encontrado para ser uma mistura contendo cerca de 55% em peso (4-terc-amilfenil) éster de ácido N,N'-(metanodiil-difenil)-di (carbâmico). Cerca de 5,1 kg de um composto hidróxi aromático (4-terc-amil fenol) foram adicionados à mistura para obter uma solução homogênea seguido por transferir a solução a um tanque de armazenamento 404.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 18 foi usado.

Um aparelho de destilação de película fina 1002 (Kobelco Eco-Solutions Co., Ltd., Japão) tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 260°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,5 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 404 na etapa (C) foi colocado em um tanque de armazenamento 1001 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1200 g/h via uma linha A1. Um

componente líquido foi extraído de uma linha A4 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 1002 e recuperado em um tanque de armazenamento 1003. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 1003 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 1002 através de uma linha A3. Um componente gasoso foi extraído de uma linha A4 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 1002. O componente gasoso foi introduzido em uma coluna de destilação 1004, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 1009 de uma linha A8 provida em uma porção da coluna de destilação 1004 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 1014 de uma linha A12 provida em uma porção da coluna de destilação 1009 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa.

Um componente de fase gasosa foi extraído de uma linha A13 provido no topo da coluna de destilação 1014 e condensado em um condensador 1015, e o condensado foi recuperado em um tanque de armazenamento 1019. Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN, foi encontrado para ser uma solução contendo cerca de 99% em peso de diisocianato de 4,4'-difenilmetano (MDI). O rendimento com base em anilina foi cerca de 50%.

Etapa (E): Produção de éster de ácido carbâmico N-substituído re-utilizando a mistura obtida no condensador

Quando o teor de amônia da mistura recuperada no tanque de armazenamento 109 na etapa (B) de exemplo 3 foi analisado, foi encontrado para ser 1800 ppm. 19,0 kg de 4-terc-amil fenol e 0,690 kg de uréia foram adicionados a 14,7 kg da mistura seguido por transferência no tanque de

agitação 603 e realizar o mesmo método como na etapa (A) usando 0,820 kg de anilina. Uma solução contendo 4,5% em peso de feniluréia foi obtida. O mesmo método como na etapa (B) foi realizado usando esta solução em vez da solução de etapa (A). O rendimento de (4-terc-amilfenil) éster de ácido N-fenilcarbâmico no líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 com base em anilina foi cerca de 93%.

[Exemplo 5]

Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por via 3)

Via (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho usado na FIG. 13 foi usado.

14,6 kg de um solvente (1-octanol, Wako Pure Chemical Industries, Ltd., Japão) e 1,47 kg de uréia foram misturados no tanque de armazenamento 101 aquecido a 120°C com a linha 13 fechada, e a mistura foi transferida ao tanque de agitação 103 (volume interno: 80 L, provido com anteparos) aquecido a 120°C. 0,87 kg de uma amina orgânica na forma de 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foram então alimentados na taxa de cerca de 10 g/min a partir do tanque de armazenamento 102 no tanque de agitação 103 via a linha 12 enquanto agitando o tanque de agitação 103. Após completar a alimentação de 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina, a agitação foi continuada durante cerca de 2 horas e o líquido de reação foi amostrado. Como um resultado de analisar o líquido de reação por cromatografia líquida, o líquido de reação foi verificado conter cerca de 7,87% em peso de 3-(ureído metil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia. Além disso, a concentração de amônia no líquido de reação foi de 7300 ppm. 13,4 kg de um composto hidróxi aromático na forma de p-dodecil fenol foram adicionados a partir do tanque de armazenamento 101 para obter uma solução homogênea. Linha 13 foi aberta e a solução foi transferida para o tanque de armazenamento

104 via a linha 13.

Etapas (R) e (D): Produção de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O aparelho mostrado na FIG. 13 ainda foi usado.

Uma coluna recheada 105 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a 190°C. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado de uma linha 14 provido na coluna recheada 105 na taxa de cerca de 1,1 g/min. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentada após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 15,1 kg. O líquido de reação foi recuperado em um tanque de armazenamento 110 através de uma linha 16 provida no fundo da coluna recheada 105. Um componente de fase gasosa foi condensado de uma linha 15 provido no topo da coluna recheada 105 com um condensador 106, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado em um tanque de armazenamento 109 via um separador de gás líquido 108. Quando um componente condensado recuperado no tanque de armazenamento 109 foi analisado por ^{1}H-RMN, o componente condensado foi verificado conter 1-octanol e uréia. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi de 8,80 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter (1-octil) éster de ácido 3-((1-octilóxi) carbonilamidometil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico, e o rendimento com base em 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foi cerca de 95%. A concentração de amônia do líquido de reação foi de 5,8 ppm.

Etapa (P): Reação de transesterificação

O aparelho mostrado na FIG. 16 foi usado.

0,5% em peso de um catalisador na forma de dilaurato de dibutil estanho foi adicionado no líquido de reação obtido na etapa descrita acima, e a

solução resultante foi colocada em um tanque de armazenamento 501. Uma coluna recheada 502 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a 260°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 26 kPa. A mistura no tanque de armazenamento 501 foi alimentada de uma linha 51 provida na coluna recheada 502 na taxa de cerca de 1,9 g/min. Um líquido de reação foi recuperado em um tanque de armazenamento 505 via uma linha 54 provida no fundo da coluna recheada 502. Um componente de fase gasosa foi introduzido em um condensador 503 de uma linha 52 provida no topo da coluna recheada 502, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado em um tanque de armazenamento 504 através de um separador de gás líquido 507. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 505 foi de 18,2 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi encontrado para ser uma solução contendo (p-dodecilfenil) éster de ácido 3-((p-dodecilfenilóxi) carbonilamidometil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico, e o rendimento com base em 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foi cerca de 89%.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

Um aparelho de destilação de película fina 602 (Kobelco Eco-Solutions Co., Ltd., Japão) tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 220°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,3 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 na etapa (B) foi colocado em um tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1080 g/h via uma linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provido no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado em um tanque de armazenamento 603. O

componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 602 através de uma linha 63. Um componente gasoso contendo diisocianato de isoforona e p-dodecil fenol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O componente gasoso foi introduzido em uma coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. O componente de fase gasosa foi condensado em um condensador 610 via uma linha 69 e recuperado em um tanque de armazenamento 612 através de um separador de gás líquido 611.

Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de isoforona. O rendimento com base na amina orgânica (3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina) foi cerca de 83%.

Etapa (E): Produção de éster de ácido carbâmico N-substituído re-utilizando a mistura obtida no condensador

Quando a concentração de amônia da mistura recuperada no tanque de armazenamento 109 na etapa (B) de exemplo 4 foi analisada, foi encontrado para ser 1300 ppm. 7,57 kg de 1-octanol e 0,70 kg de uréia foram adicionados a 9,4 kg da mistura seguido por transferência no tanque de agitação 103 e realizar o mesmo método como na etapa (A) usando 0,87 kg de 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina. Uma solução contendo 6,3% em peso de 3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia foi obtida. O mesmo método como na etapa (B) foi realizado usando esta solução em vez da solução de etapa (A). O líquido de reação recuperado em um tanque de armazenamento 110 continha (3-metilbutil) éster de ácido 3-((3-metilbutilóxi)

carbonilamidometil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico, e o rendimento de (3-metilbutil) éster de ácido 3-((3-metilbutilóxi) carbonilamidometil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico com base em 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foi cerca de 95%.

[Exemplo 6]

Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por via 4)

Via (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho usado na FIG. 13 foi usado.

33,5 kg de um solvente (1-nonanol) e 3,34 kg de uréia foram misturados no tanque de armazenamento 101 aquecido a 90°C com a linha 13 fechada, e a mistura foi transferida ao tanque de agitação 103 aquecida a 90°C. 1,08 kg de anilina foram então alimentados na taxa de cerca de 12 g/min a partir do tanque de armazenamento 102 no tanque de agitação 603 via a linha 12 enquanto agitando o tanque de agitação 103. Após completar a alimentação a anilina, a agitação foi continuada durante cerca de 28 horas e o líquido de reação foi amostrado. Como um resultado de analisar o líquido de reação por cromatografia líquida, o líquido de reação foi verificado conter cerca de 5,6% em peso de feniluréia. A concentração de amônia no líquido de reação foi de 7900 ppm. Grupos amino não reagidos não foram detectados. Após a reação, 25,9 kg de um composto hidróxi aromático na forma de 2-fenil fenol foram adicionados para obter uma mistura. A relação do número de moléculas de álcool para o número de grupos ureído na mistura foi de 10,1. Linha 63 foi aberta e a mistura foi transferida para o tanque de armazenamento 604 via a linha 63.

Etapas (R) e (D): Produção de mono (-O-R^2 éster) de ácido carbâmico N-substituído

A coluna recheada 105 recheada com um material de recheio

(Helipack No. 3) foi aquecida a 210°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 50 kPa. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado a partir da linha 14 provido na coluna recheada 105 na taxa de cerca de 1,2 g/min. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentada após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 35,8 kg. O líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 110 através da linha 16 provido no fundo da coluna recheada 105. Um componente de fase gasosa foi introduzido no condensador 106 a partir da linha 15 provido no topo da coluna recheada 105, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado no tanque de armazenamento 109 via o separador de gás líquido 108. Quando o componente condensado recuperado no tanque de armazenamento 109 foi analisado por ^{1}H-RMN, o componente condensado foi verificado conter uréia e 1-nonanol. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi de 18,9 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter (nonil éster) de ácido N-fenil carbâmico, e o rendimento de (noniléster) de ácido N-fenil carbâmico com base em anilina foi cerca de 91%.

Etapa (P): Produção de mono (-O-aril éster) de ácido carbâmico N-substituído por reação de transesterificação

O aparelho mostrado na FIG. 16 foi usado.

0,5% em peso de um catalisador na forma de dilaurato de dibutil estanho foi adicionado na mistura obtido na etapa (B) e colocado no tanque de armazenamento 501. Uma coluna recheada 502 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) e tendo um diâmetro interno de 20 mm foi aquecido a 260°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 26 kPa. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado de uma linha 51 provido na coluna recheada 105 na taxa de cerca de 1,9 g/min. Um líquido de reação foi

recuperado no tanque de armazenamento 505 via a linha 54 provido no fundo da coluna recheada 502. Um componente de fase gasosa foi introduzido no condensador 503 de uma linha 52 provido no topo da coluna recheada 502, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado no tanque de armazenamento 504 através do separador de gás líquido 507. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 505 foi de 26,4 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi encontrado para ser uma solução contendo (2-fenilfenil) éster de ácido N-fenil carbâmico, e o rendimento de (2-fenilfenil) éster de ácido N-fenil carbâmico com base em anilina foi cerca de 89%.

Etapa (C): Condensação de mono (-O-aril éster) de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 15 foi usado.

O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 505 na etapa (B) foi colocado no tanque de agitação 408. O tanque de agitação 408 foi aquecido a 160°C e a pressão interna foi configurada a 1 kPa seguido por destilação de 2-fenil fenol. O 2-fenil fenol foi condensado no condensador 405 via a linha 44 e recuperado no tanque de armazenamento 407. A seguir, 2,04 kg de metilal a partir do tanque de armazenamento 400, 1,94 kg de nitrobenzol a partir do tanque de armazenamento 401, e 1,02 kg de ácido sulfúrico a partir do tanque de armazenamento 402 foram adicionados no tanque de agitação 408 seguido por aquecimento durante 24 horas a 90°C enquanto agitando o tanque de agitação 408. O solvente e as substâncias não reagidas foram então destiladas mantendo a temperatura do tanque de agitação 408 a 90°C e reduzir a pressão interna para cerca de 1 kPa. Quando o composto resultante foi analisado por cromatografia líquida, foi encontrado para ser uma mistura contendo cerca de 53% em peso de (2-fenilfenil) éster de ácido N,N'-(metanodiil-difenil)-bis (carbâmico).

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 18 foi usado.

Um aparelho de destilação de película fina 1002 (Kobelco Eco-Solutions Co., Ltd., Japão) tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 260°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,5 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 404 na etapa (C) foi colocado em um tanque de armazenamento 1001 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1200 g/h via uma linha A1. Um componente líquido foi extraído de uma linha A4 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 1002 e recuperado em um tanque de armazenamento 1003. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 1003 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 1002 através de uma linha A3. Um componente gasoso foi extraído de uma linha A4 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 1002. O componente gasoso foi introduzido em uma coluna de destilação 1004, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 1009 de uma linha A8 provida em uma porção da coluna de destilação 1004 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. Um componente de fase líquida foi alimentado na coluna de destilação 1014 de uma linha A12 provida em uma porção da coluna de destilação 1009 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa.

Um componente de fase gasosa foi extraído de uma linha A13 provido no topo da coluna de destilação 1014 e condensado no condensador 1015, e o condensado foi recuperado no tanque de armazenamento 1019.

Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN, foi encontrado para ser uma solução contendo cerca de 99% em peso de diisocianato de 4,4'-difenilmetano (MDI). O rendimento com base em anilina foi cerca de 54%.

Etapa (E): Produção de éster de ácido carbâmico N-substituído re-utilizando a mistura obtida no condensador

Quando o teor de amônia da mistura recuperada no tanque de armazenamento 109 na etapa (R) de exemplo 5 foi analisado, foi encontrado para ser 1500 ppm. 11,4 kg de 1-nonanol e 1,47 kg de uréia foram adicionados a 14,7 kg da mistura seguido por transferência no tanque de agitação 603 e realizar o mesmo método como na etapa (A) usando 1,08 kg de anilina. Uma solução contendo cerca de 6,8% em peso de feniluréia foi obtida. O mesmo método como na etapa (B) foi realizado usando esta solução em vez da solução de etapa (A). O rendimento de (noniléster) de ácido N-fenilcarbâmico no líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 com base em anilina foi cerca de 91%.

[Exemplo 7]

Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por via 5)

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho usado na FIG. 13 foi usado.

25,4 kg de um solvente (1-heptanol) e 3,50 kg de uréia foram misturados no tanque de armazenamento 101 aquecido a 90°C com a linha 13 fechada, e a mistura foi transferida ao tanque de agitação 103 aquecido a 90°C. 1,13 kg de anilina foram então alimentados na taxa de cerca de 18 g/min a partir do tanque de armazenamento 102 no tanque de agitação 103 via a linha 12 enquanto agitando o tanque de agitação 603. Após completar a alimentação a anilina, a agitação foi continuada durante cerca de 28 horas e o líquido de reação foi amostrado. Como um resultado de analisar o líquido de reação por

cromatografia líquida, o líquido de reação foi verificado conter cerca de 7,4% em peso de feniluréia. A concentração de amônia no líquido de reação foi de 8300 ppm. Grupos amino não reagidos não foram detectados. 24,2 kg de um composto hidróxi na forma de 2,4-di-terc-amil fenol (Tokyo Chemical Industry Co., Ltd., Japão) foram adicionados no líquido de reação para obter uma mistura. A relação do número de moléculas de álcool para o número de grupos ureído na mistura foi de 9,0.

Linha 63 foi aberta e a mistura foi transferida para o tanque de armazenamento 604 via a linha 63.

Etapas (R) e (D): Produção de mono (-O-alquil éster) de ácido carbâmico N-substituído

A coluna recheada 105 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) e tendo um diâmetro de 40 mm foi aquecida a 190°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 50 kPa. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado a partir da linha 14 provido na coluna recheada 105 na taxa de cerca de 1,0 g/min. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentada após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 28,0 kg. O líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 110 através da linha 16 provida no fundo da coluna recheada 105. Um componente de fase gasosa foi condensado no condensador 106 a partir da linha 15 provido no topo da coluna recheada 105, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado no tanque de armazenamento 109 via o separador de gás líquido 108. Quando o componente condensado recuperado no tanque de armazenamento 109 foi analisado por ^{1}H-RMN, o componente condensado foi verificado conter uréia e 1-heptanol. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi de 13,8 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido

de reação foi verificado conter (1-heptil) éster de ácido N-fenil carbâmico, e o rendimento com base em anilina foi cerca de 90%.

Etapa (C): Condensação de mono (-O-alquil éster) de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 15 foi usado.

O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 na etapa (R) foi colocado no tanque de agitação 408. O tanque de agitação 408 foi aquecido a 160°C e a pressão interna foi configurada a 1 kPa seguido por destilação de 1-heptanol. O 1-heptanol foi condensado no condensador 405 via a linha 44 e recuperado no tanque de armazenamento 407. A seguir, 1,30 kg de metilal a partir do tanque de armazenamento 400, 7,34 kg de nitrobenzol a partir do tanque de armazenamento 401, e 1,33 kg de ácido sulfúrico a partir do tanque de armazenamento 402 foram adicionados no tanque de agitação 408 seguido por aquecimento durante 10 horas a 100°C enquanto agitando o tanque de agitação 408. O solvente e as substâncias não reagidas foram então destiladas mantendo a temperatura do tanque de agitação 408 a 100°C e reduzir a pressão interna para cerca de 1 kPa. Quando o composto resultante foi analisado por cromatografia líquida, foi encontrado para ser uma mistura contendo cerca de 63% em peso de N,N'-(metanodiil-difenil)-bis (octil éster de ácido carbâmico). 24,2 kg de um composto hidróxi aromático na forma de 2,4-di-terc-amil fenol foram então adicionados à mistura para obter uma mistura.

Etapa (P): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por reação de transesterificação

O aparelho mostrado na FIG. 16 foi usado.

0,5% em peso de um catalisador na forma de dilaurato de dibutil estanho foi adicionado na mistura obtido na etapa (C) e colocado no tanque de armazenamento 501. A coluna recheada 502 recheada com um material de

recheio (Helipack No. 3) e tendo um diâmetro interno de 20 mm foi aquecida a 250°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 20 kPa. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado de uma linha 51 provido na coluna recheada 502 na taxa de cerca de 1,3 g/min. Um líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 505 via a linha 54 provida no fundo da coluna recheada 502. Um componente de fase gasosa foi introduzido no condensador 503 de uma linha 52 provido no topo da coluna recheada 502, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado no tanque de armazenamento 504 através do separador de gás líquido 507. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 505 foi de 25,0 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi encontrado para ser uma solução contendo N,N'-(metanodiil-difenil)-bis (2,4-diterc-amilfenil) éster de ácido carbâmico).

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 18 foi usado.

Um aparelho de destilação de película fina 1002 (Kobelco Eco-Solutions Co., Ltd., Japão) tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 260°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,5 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 404 na etapa (C) foi colocado em um tanque de armazenamento 1001 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1200 g/h via uma linha A1. Um componente líquido foi extraído de uma linha A4 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 1002 e recuperado em um tanque de armazenamento 1003. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 1003 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 1002 através de uma linha A3. Um componente gasoso foi

extraído de uma linha A4 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 1002. O componente gasoso foi introduzido em uma coluna de destilação 1004, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 1009 de uma linha A8 provida em uma porção da coluna de destilação 1004 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. Um componente de fase líquida foi alimentado na coluna de destilação 1014 de uma linha A12 provida em uma porção da coluna de destilação 1009 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa.

Um componente de fase gasosa foi extraído de uma linha A13 provido no topo da coluna de destilação 1014 e condensado no condensador 1015, e o condensado foi recuperado no tanque de armazenamento 1019. Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN, foi encontrado para ser uma solução contendo cerca de 99% em peso de diisocianato de 4,4'-difenilmetano (MDI). O rendimento com base em anilina foi cerca de 47%.

Etapa (E): Produção de éster de ácido carbâmico N-substituído re-utilizando a mistura obtida no condensador

Quando o teor de amônia da mistura recuperada no tanque de armazenamento 109 na etapa (B) de exemplo 6 foi analisado, foi encontrado para ser 900 ppm. 9,48 kg de 1-heptanol e 1,54 kg de uréia foram adicionados à mistura seguida por transferência no tanque de agitação 603 e realizar o mesmo método como na etapa (A) usando 1,12 kg de anilina. Uma solução contendo cerca de 7,4% em peso de feniluréia foi obtida. O mesmo método como na etapa (B) foi realizado usando esta solução em vez da solução de etapa (A). O rendimento de (heptiléster) de ácido N-fenilcarbâmico no líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 com base em anilina foi cerca de 90%.

[Exemplos 8 a 30]

O mesmo método como no exemplo 1 foi realizado enquanto mudando os compostos e as condições de reação usados. Os compostos e as condições de reação usados na etapa (A) de exemplos 8 a 30 junto com os resultados são mostrados na tabelas 2 e 3. Além disso, os compostos e as condições de reação usados nas etapas (B) e (D) de exemplos 8 a 30 junto com os resultados são mostrados na tabelas 4 e 5. Além disso, os compostos e as condições de reação usados na etapa (F) de exemplos 8 a 30 junto com os resultados são mostrados na tabelas 6 e 7. Através da "FIG. 17" e "FIG. 18" são indicados na coluna de "Desenho do aparelho" para etapa (F), "FIG. 17" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 1 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 17. Por outro lado, "FIG. 18" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 4 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 18. Além disso, os compostos e as condições de reação usados na etapa (E) de exemplos 8 a 30 junto com os resultados são mostrados na tabelas 8 e 9. Além disso, as condições de reação e resultados para o exemplo 1 também são mostrados nas tabelas 2 a 9 para esclarecer a correspondência com a descrição de exemplo 1.

Além disso, as seguintes abreviações são usadas nas tabelas dos exemplos.

HDA: Hexametilenodiamina

IPDA: 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina

TDA: 2,4-toluenodiamina

MDA: 4,4'-metilenodianilina

H-MDA: 4,4'-metilenodi (ciclohexilamina)

[Tabela 2]

Exemplo	Etapa (A)											
	Temperatura do tanque de agitação 103 (°C)	Amina orgânica (quantidade usada)		Quantidade de uréia usada	Composto hidróxi aromático			Taxa de alimentação da amina orgânica	Solução após a reação			
					Nome	Quantidade usada	Teor de água		Composto tendo grupos ureído formados	Concentração composto tendo grupos ureído	Concentração de amônia (ppm)	Relação no. moléculas composto hidróxi aromático p/ no. grupos ureído
Exemplo 1	120	HDA	(1,50 kg)	3,10 kg	p-heptil fenol	(41,8 kg)	15 ppm	20 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	6,3% em peso	6300 ppm	7,5
Exemplo 8	190	HDA	(1,42 kg)	3,31 kg	2-naftol	(29,9 kg)	13 ppm	83 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	7,2% em peso	6200 ppm	8,6
Exemplo 9	150	HDA	(1,29 kg)	2,68 kg	4-fenil fenol	(18,9 kg)	16 ppm	20 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	10% em peso	5100 ppm	5,1
Exemplo 10	100	HDA	(1,14 kg)	2,42 kg	2-etoxifenol	(18,9 kg)	20 ppm	15 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	11,3% em peso	4500 ppm	9,2
Exemplo 11	130	IPDA	(1,82 kg)	2,25 kg	4-cumil fenol	(14,5 kg)	16 ppm	42 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia	14,9% em peso	3500 ppm	3,2
Exemplo 12	100	IPDA	(1,22 kg)	1,64 kg	4-(1,1,3,3-tetrametilbutil)	(8,26 kg)	630 ppm	20 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-	14,6% em peso	7800 ppm	3,3

					fenol				trimetilciclohexiluréia			
Exemplo 13	100	IPDA	(1,19 kg)	1,61 kg	p-nonil fenol	(61,6 kg)	20 ppm	20 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia	2,7% em peso	6200 ppm	20,4
Exemplo 14	110	IPDA	(1,01 kg)	1,35 kg	p-dodecil fenol	(62,3 kg)	58 ppm	20 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia	2,3% em peso	3800 ppm	20,6
Exemplo 15	100	TDA	(2,11 kg)	3,38 kg	p-dodecil fenol	(19 kg)	720 ppm	20 g/min	2,4-toluenodiuréia	12,2% em peso	8820 ppm	2,5
Exemplo 16	90	TDA	(3,51 kg)	1,99 kg	4-terc-butil fenol	(16,4 kg)	14 ppm	13 g/min	2,4-toluenodiuréia	18,6% em peso	3600 ppm	2,5
Exemplo 17	70	TDA	(1,19 kg)	2,46 kg	p-nonil fenol	(38,6 kg)	530 ppm	17 g/min	2,4-toluenodiuréia	4,8% em peso	8210 ppm	9,1
Exemplo 18	80	TDA	(1,21 kg)	2,49 kg	2-naftol	(28,6 kg)	210 ppm	20 g/min	2,4-toluenodiuréia	6,4% em peso	4200 ppm	10,1

[Tabela 3]

Exemplo	Etapa (A)					
	Temperatura	Amina orgânica	Quantidade	Composto hidróxi aromático	Taxa de	Solução após a reação

	do tanque de agitação 103 (°C)	(quantidade usada)		de uréia usada	Nome	Quantidade usada	Teor de água	alimentação da amina orgânica	Composto tendo grupos ureído formados	Concentração de composto tendo grupos ureído	Concentração de amônia (ppm)	Relação de número moléculas composto hidróxi aromático p/ número grupos ureído
Exemplo 19	80	TDA	(1,53 kg)	3,08 kg	3,5-dimetoxi fenol	(32,8 kg)	150 ppm	20 g/min	2,4-tolueno diuréia	6,9% em peso	3200 ppm	8,6
Exemplo 20	100	MDA	(0,53 kg)	0,64 kg	4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol	(44,1 kg)	35 ppm	90 g/min	4,4'-metanodi il difenildiuréia	1,6% em peso	2250 ppm	41,2
Exemplo 21	80	MDA	(0,53 kg)	0,75 kg	3,5-dimetoxi fenol	(51,0 kg)	40 ppm	20 g/min	4,4'-metanodi il difenildiuréia	1,1% em peso	1080 ppm	120,7
Exemplo 22	100	H-MDA	(0,41 kg)	2,03 kg	4-etil fenol	(31,9 kg)	80 ppm	25 g/min	4,4'-metanodi il diciclohexil diuréia	5,7% em peso	5210 ppm	19,4
Exemplo 23	100	H-MDA	(1,38 kg)	2,05 kg	2-terc-amil fenol	(37,7 kg)	120 ppm	24 g/min	4,4'-metanodi il diciclohexil diuréia	4,7% em peso	3620 ppm	17,9
Exemplo	200	HDA	(0,93	8,65 kg	Hidroquinona	(52,9 kg)	330	170 g/min	1,1'-(hexano-	2,3% em	2400	33,3

24			kg)				ppm		1,6-diil) diuréia	peso	ppm	
Exemplo 25	180	IPDA	(0,83 kg)	4,39 kg	Bisfenol A	(53,4 kg)	20 ppm	180 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilcicloh exiluréia	2,1% em peso	2200 ppm	24,7
Exemplo 26	120	HDA	(0,93 kg)	2,02 kg	2,4-di-terc-amil fenol	(56,3 kg)	32 ppm	42 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	2,8% em peso	2300 ppm	15,3
Exemplo 27	120	HDA	(0,53 kg)	1,15 kg	2,4-dicumil fenol	(55,8 kg)	50 ppm	45 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	1,6% em peso	1100 ppm	18,9
Exemplo 28	130	HDA	(1,09 kg)	2,31 kg	2-fenil fenol	(55,9 kg)	14 ppm	38 g/min	1,1-(hexano-1,6-diil) diuréia	3,2% em peso	1020 ppm	17,9
Exemplo 29	130	IPDA	(1,15 kg)	1,66 kg	2,6-diisopropil fenol	(32,5 kg)	90 ppm	29 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilcicloh exiluréia	4,5% em peso	1900 ppm	13,8
Exemplo 30	100	IPDA	(1,15 kg)	2,03 kg	4-clorofenol	(52,1 kg)	310 ppm	40 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilcicloh exiluréia	3,1% em peso	1200 ppm	30,6

[Tabela 4]

Exemplo	Etapa (B)						Etapa (D)		
	Temperatura de coluna recheada 105 (°C)	Pressão de coluna recheada 105 (kPa)	Quantidade alimentada (kg)	O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído formado (rendimento com base na amina orgânica)		Concentração de amônia no líquido de reação	Quant. recuperada no tanque armazenamento 109 (kg)	Teor de composto hidróxi aromático (%)	Teor uréia (%)
Exemplo 1	240	26	35,1	N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico)	(97%)	9,0 ppm	13,5	85,4	10,2
Exemplo 8	240	15	32,5	N,N'-hexanodiil-di ((2-naftil) éster de ácido carbâmico)	(92%)	11,8 ppm	11,1	80,7	14,3
Exemplo 9	280	30	21,1	N,N'-hexanodiil-di ((4-fenilfenill) éster de ácido carbâmico)	(97%)	9,5 ppm	7,5	73,5	15,2
Exemplo 10	210	40	20,0	N,N'-hexanodiil-di ((2-etoxifenill) éster de ácido carbâmico)	(75%)	330 ppm	6,8	79,8	15,7
Exemplo 11	280	30	17,3	(4-(α,α-dimetilbenzil) fenil) éster de ácido 3-(4-(α,α-dimetilbenzil) fenóxi) carbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico	(95%)	7,5 ppm	5,5	80,1	16,0
Exemplo 12	230	20	9,3	(4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil) éster de ácido 3-((-4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenóxi) carbonilamino-metil-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico	(84%)	8,1 ppm	5,9	70,9	24,0
Exemplo	210	20	60,7	(p-nonilfenil) éster de ácido	(85%)	290 ppm	19,9	95,7	3,5

13				3-((p-nonilfenóxi) carbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico					
Exemplo 14	230	40	61,5	(p-dodecilfenil) éster de ácido 3-((p-dodecilfenóxi) carbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico	(78%)	305 ppm	7,8	90,1	7,9
Exemplo 15	220	15	23,8	(4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil) éster de ácido tolueno-2,4-di (carbâmico)	(73%)	5,9 ppm	8,8	61,3	30,7
Exemplo 16	210	26	22,5	(4-terc-butilfenil) éster de ácido tolueno-2,4-di (carbâmico)	(65%)	6,9 ppm	8,2	55,9	37,9
Exemplo 17	250	20	40,5	(p-nonilfenil) éster de ácido tolueno-2,4-di (carbâmico)	(91%)	8,2 ppm	13,5	89,0	8,9
Exemplo 18	240	20	29,5	(2-naftil) éster de ácido tolueno-2,4-di (carbâmico)	(70%)	980 ppm	9,9	86,1	11,9

[Tabela 5]

Exemplo	Etapa (B)						Etapa (D)		
	Temperatura de coluna recheada 105 (°C)	Pressão de coluna recheada 105 (kPa)	Quantidade alimentada (kg)	O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído formado (rendimento com base na amina orgânica)		Concentração de amônia no líquido de reação	Quant. recuperada tanque de armazenamento 109 (kg)	Teor de composto hidróxi aromático (%)	Teor de uréia (%)
Exemplo	250	30	34,6	(3,5-dimetoxifenil) éster de ácido	(62%)	1050 ppm	11,6	85,4	12,5

19				toluено-2,4-di (carbâmico)					
Exemplo 20	250	45	43,8	(4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil) éster de ácido N,N'-(4,4'-metanodiil-difenil)-di (carbâmico)	(87%)	11 ppm	14,4	97,7	2,0
Exemplo 21	220	30	43,8	(3,5-dimetoxifenil) éster de ácido N,N'-(4,4'-metanodiil-difenil)-di (carbâmico)	(88%)	15 ppm	14,6	97,1	2,3
Exemplo 22	200	70	33,6	(4-etilfenil) éster de ácido N,N'-(4,4'-metanodiil-diciclohexil)-di (carbâmico)	(92%)	29 ppm	11,3	89,5	10,4
Exemplo 23	230	35	43,9	(2terc-amilfenil) éster de ácido N,N'-(4,4'-metanodiil-diciclohexil)-di (carbâmico)	(93%)	11 ppm	18,1	65,5	33,4
Exemplo 24	250	40	55,8	(4-hidroxifenil) éster de ácido N,N'-hexanodiil-di (carbâmico)	(68%)	9,5 ppm	22,7	69,1	30,0
Exemplo 25	280	15	56,3	(4-(2-(4-hidroxifenil)-2-metil-etil) fenil) éster de ácido N,N'-hexanodiil-di (carbâmico)	(69%)	6,5 ppm	20,8	81,5	17,0
Exemplo 26	240	30	53,9	(2,4-diterc-amilfenil) éster de ácido N,N'-hexanodiil-di (carbâmico)	(75%)	8,3 ppm	17,9	92,4	5,0
Exemplo 27	280	10	55,0	(2,4-di-cumilfenil) éster de ácido N,N'-hexanodiil-di (carbâmico)	(70%)	5,4 ppm	18,2	95,1	2,9
Exemplo	270	20	53,9	(2-fenilfenil) éster de ácido	(81%)	4,4 ppm	17,9	92,2	5,6

28				N,N'-hexanodiil-di (carbâmico)					
Exemplo 29	220	20	33,5	(2,6-diisopropilfenil) éster de ácido 3-((2,6-diisopropilfenóxi) carbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico	(54%)	8,1 ppm	11,0	90,4	6,8
Exemplo 30	210	60	50,5	(4-clorofenil) éster de ácido 3-((4-clorofenóxi) carbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico	(90%)	5,9 ppm	16,8	92,0	6,1

[Tabela 6]

Exemplo	Etapa (F)				
	Desenho do aparelho	Temperatura de aparelho de destilação de película fina (°C)	Pressão de aparelho dest. película fina (kPa)	Isocianato recuperado (rendimento com base na amina orgânica)	
Exemplo 1	FIG. 17	220	1,3	Diisocianato de hexametileno	(90%)
Exemplo 8	FIG. 17	200	1,0	Diisocianato de hexametileno	(93%)
Exemplo 9	FIG. 17	210	2,0	Diisocianato de hexametileno	(92%)
Exemplo 10	FIG. 18	190	1,0	Diisocianato de hexametileno	(71%)
Exemplo 11	FIG. 17	220	1,5	Diisocianato de isoforona	(92%)
Exemplo 12	FIG. 17	210	1,0	Diisocianato de isoforona	(81%)
Exemplo 13	FIG. 17	220	1,0	Diisocianato de isoforona	(83%)
Exemplo 14	FIG. 17	230	0,5	Diisocianato de isoforona	(75%)

Exemplo 15	FIG. 17	190	0,8	diisocianato de 2,4-tolileno	(65%)
Exemplo 16	FIG. 18	190	0,8	diisocianato de 2,4-tolileno	(58%)
Exemplo 17	FIG. 17	200	1,2	diisocianato de 2,4-tolileno	(86%)
Exemplo 18	FIG. 17	210	1,0	diisocianato de 2,4-tolileno	(65%)

[Tabela 7]

Exemplo	Etapa (F)				
	Desenho do aparelho	Temperatura de aparelho de destilação de película fina (°C)	Pressão de aparelho de destilação de película fina (kPa)	Isocianato recuperado (rendimento com base na amina orgânica)	
Exemplo 19	FIG. 17	220	2,5	diisocianato de 2,4-tolileno	(59%)
Exemplo 20	FIG. 18	240	0,8	diisocianato de 4,4'-difenilmetano	(72%)
Exemplo 21	FIG. 18	250	1,0	diisocianato de 4,4'-difenilmetano	(66%)
Exemplo 22	FIG. 18	260	1,3	diisocianato de 4,4'-diciclohexilmetano	(89%)
Exemplo 23	FIG. 18	260	1,3	diisocianato de 4,4'-diciclohexilmetano	(89%)
Exemplo 24	FIG. 17	250	1,0	Diisocianato de hexametileno	(63%)
Exemplo 25	FIG. 17	250	1,0	Diisocianato de isoforona	(56%)
Exemplo 26	FIG. 17	250	1,0	Diisocianato de hexametileno	(66%)
Exemplo 27	FIG. 17	250	1,0	Diisocianato de hexametileno	(62%)
Exemplo 28	FIG. 17	250	1,0	Diisocianato de hexametileno	(75%)
Exemplo 29	FIG. 18	250	1,0	Diisocianato de isoforona	(50%)
Exemplo 30	FIG. 18	250	1,0	Diisocianato de isoforona	(56%)

[Tabela 8]

Exemplo	Etapa (E)						
	Teor de amônia de mistura recuperada no tanque de armazenamento 109	Amina orgânica (quantidade usada)		Quantidade de uréia adicionada	Composto hidróxi aromático adicionado (quantidade usada)		Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído com base na amina orgânica
Exemplo 1	820	HDA	(0,92 kg)	3,10 kg	p-heptil fenol	(41,8 kg)	97%
Exemplo 8	1200	HDA	(1,18 kg)	1,03 kg	2-naftol	(15,2 kg)	97%
Exemplo 9	5300	HDA	(1,19 kg)	0,55 kg	4-fenil fenol	(8,29 kg)	88%
Exemplo 10	530	HDA	(1,14 kg)	0,63 kg	2-etóxi fenol	(9,53 kg)	75%
Exemplo 11	940	IPDA	(1,80 kg)	1,33 kg	4-cumil fenol	(9,97 kg)	95%
Exemplo 12	2200	IPDA	(1,29 kg)	0,98 kg	4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol	(6,52 kg)	80%
Exemplo 13	1500	IPDA	(1,19 kg)	0,89 kg	p-nonil fenol	(42,5 kg)	85%
Exemplo 14	1200	IPDA	(1,01 kg)	0,74 kg	p-dodecil fenol	(55,3 kg)	78%

[Tabela 9]

Exemplo	Etapa (E)						
	Teor de amônia de mistura recuperada no tanque de armazenamento 109	Amina orgânica (quantidade usada)		Quantidade de uréia adicionada	Composto hidróxi aromático adicionado (quantidade usada)		Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído com base na amina orgânica
Exemplo 15	1350	TDA	(2,11 kg)	1,98 kg	p-dodecil fenol	(13,7 kg)	73%
Exemplo 16	450	TDA	(3,51 kg)	3,61 kg	4-terc-butil fenol	(11,8 kg)	65%
Exemplo 17	190	TDA	(1,20 kg)	1,04 kg	p-nonil fenol	(24,6 kg)	91%
Exemplo 18	320	TDA	(1,23 kg)	1,35 kg	2-naftol	(20,5 kg)	70%
Exemplo 19	1500	TDA	(1,42 kg)	2,86 kg	3,5-dimetoxi fenol	(30,5 kg)	62%
Exemplo 20	560	MDA	(0,53 kg)	0,31 kg	4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol	(29,9 kg)	87%
Exemplo 21	270	MDA	(0,41 kg)	0,32 kg	3,5-dimetoxi fenol	(36,9 kg)	88%
Exemplo 22	3200	H-MDA	(1,45 kg)	0,35 kg	4-etil fenol	(17,7 kg)	85%
Exemplo 23	350	H-MDA	(1,29 kg)	0,10 kg	2-terc-amil fenol	(22,4 kg)	93%

[Exemplos 31 a 42]

O mesmo método como no exemplo 2 foi realizado enquanto mudando os compostos e as condições de reação usados. Os compostos e as condições de reação usados na etapa (A) de exemplos 31 a 42 junto com os resultados são mostrados na tabela 10. Além disso, os compostos e as condições de reação usados na etapa (D) de exemplos 21 a 32 junto com os resultados são mostrados na tabela 11. Os compostos e as condições de reação usados nas etapas (B) e (F) de exemplos 26 a 37 junto com os resultados são mostrados na tabela 12. Através da "FIG. 17" e "FIG. 18" são indicados na coluna de "Desenho do aparelho" para etapa (F) na tabela 12, "FIG. 17" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 1 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 17. Por outro lado, "FIG. 18" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 4 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 18. Além disso, os compostos e as condições de reação usados na etapa (E) de exemplos 31 a 42 junto com os resultados são mostrados na tabela 13.

[Tabela 10]

Exemplo	Etapa (A)											
	Temp. do tanque de armazenamento 203 (°C)	Amina orgânica (quantidade usada)		Quantidade de uréia usada	Solvente (quantidade usada)		Taxa de aliment. amina orgânica	Composto tendo grupos ureído	Conc. de composto tendo grupos ureído	NH_3 residual	Composto hidróxi aromático adicionado após a reação (quantidade usada)	
Exemplo 2	120	HDA	(0,93 kg)	1,92 kg	1-butanol	(11,9 kg)	20 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	11,2% em peso	7500 ppm	p-heptil fenol	(23,1 kg)
Exemplo 31	120	HDA	(1,02 kg)	2,27 kg	2,6-dimetil fenol	(10,7 kg)	30 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	13,0% em peso	4300 ppm	p-nonil fenol	(19,3 kg)
Exemplo 32	100	HDA	(1,02 kg)	2,37 kg	2-isopropil fenol	(6,21 kg)	32 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	16,4% em peso	6200 ppm	4-fenil fenol	(22,4 kg)
Exemplo 33	90	HDA	(1,53 kg)	3,16 kg	Fenol	(9,90 kg)	20 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	18,5% em peso	8200 ppm	2-naftol	(18,9 kg)
Exemplo 34	150	IPDA	(1,42 kg)	2,15 kg	1-butanol	(5,55 kg)	40 g/min	3-(ureídometil)-3, 5,5- trimetil ciclohexiluréia	17,1% em peso	3400 ppm	4-terc-amil fenol	(17,8 kg)
Exemplo 35	100	IPDA	(1,39 kg)	2,50 kg	2-metil fenol	(9,71 kg)	50 g/min	3-(ureídometil)-3, 5,5- trimetil ciclohexiluréia	13,3% em peso	5600 ppm	p-dodecil fenol	(25,7 kg)
Exemplo 36	110	TDA	(2,53 kg)	5,22 kg	2,4,6-trimetil	(7,05 kg)	20 g/min	2,4-toluenodiuréia	16,0% em peso	3500 ppm	4-cumil fenol	(19,5 kg)

					fenol							
Exemplo 37	90	TDA	(1,05 kg)	2,32 kg	2-bromo fenol	(14,9 kg)	20 g/min	2,4-toluenodiuréia	9,8% em peso	9100 ppm	3,5-dim etoxi fenol	(14,6 kg)
Exemplo 38	80	TDA	(1,14 kg)	2,24 kg	3-metil-1-butanol	(2,14 kg)	20 g/min	2,4-toluenodiuréia	27,3% em peso	9300 ppm	4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol	(23,1 kg)
Exemplo 39	100	MDA	(1,64 kg)	1,99 kg	2-isopropil fenol	(12,4 kg)	40 g/min	4,4'-metanodiil difenildiuréia	14,7% em peso	2800 ppm	1-naftol	(11,9 kg)
Exemplo 40	80	MDA	(1,86 kg)	2,31 kg	1-butanol	(10,4 kg)	30 g/min	4,4'-metanodiil difenildiuréia	16,0% em peso	3200 ppm	p-heptil fenol	(14,4 kg)
Exemplo 41	160	H-MDA	(1,75 kg)	2,90 kg	2-metil fenol	(13,5 kg)	50 g/min	4,4'-metanodiil diciclohexil diuréia	13,6% em peso	2800 ppm	2,4,6-trimetil fenol	(11,3 kg)
Exemplo 42	130	H-MDA	(1,63 kg)	2,83 kg	1-heptanol	(7,02 kg)	40 g/min	4,4'-metanodiil diciclohexil diuréia	13,8% em peso	3200 ppm	4-etoxi fenol	(10,7 kg)

[Tabela 11]

Exemplo	Etapa (D)							
	Temp. da coluna de destilação 205 (°C)	Pressão na coluna de destilação 205 (kPa)	Tanque de armazenamento 209			Tanque de armazenamento 208		
			Quant. recuperada tanque de armazenamento 209 (kg)	Conc. de composto tendo grupos ureído no líquido residual (% em peso)	Relação do no. de moléculas de composto hidróxi aromático para no. de grupos ureído	Quant. recuperada tanque de armazenamento 208 (kg)	Teor de composto hidróxi (%)	Teor de uréia (%)
Exemplo 2	120	10	13,5	12	3,9	12,8	92,5	7,1
Exemplo 31	125	5	21,5	8,3	5,0	11,6	91,7	7,2
Exemplo 32	130	8	28,9	6,3	8,8	7,5	81,7	17,5
Exemplo 33	130	15	22,3	11,7	5,0	10,8	91,1	8,5
Exemplo 34	150	15	20,0	6,9	9,9	6,7	82,9	15,6
Exemplo 35	120	10	28,4	6,3	7,0	10,5	90,9	8,8
Exemplo 36	140	10	26,2	9,1	4,1	7,9	87,8	11,0
Exemplo 37	140	8	16,7	10,5	5,6	15,8	93,9	5,9
Exemplo 38	110	50	25,2	4,9	9,4	3,3	65,0	32,1
Exemplo 39	120	15	14,4	16,0	5,1	13,2	92,7	7,2
Exemplo 40	110	10	17,1	13,4	4,7	11,6	89,6	9,8
Exemplo 41	130	5	15,2	15,8	5,1	13,9	93,1	6,5
Exemplo 42	130	3	13,1	11,2	7,8	9,0	78,7	20,0

[Tabela 12]

Exemplo	Etapa (B)					Etapa (F)				
	Temp. da coluna de destilação 210 (°C)	Pressão da coluna de destilação 210 (kPa)	O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (rendimento com base na amina orgânica)		Concentração de amônia no líquido de reação	Desenho do aparelho	Temp. do aparelho de destilação de película fina (°C)	Pressão aparelho destilação película fina (kPa)	Isocianato recuperado (rendimento com base na amina orgânica)	
Exemplo 2	250	26	N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico)	(95%)	8,0 ppm	FIG. 17	220	1,3	Diisocianato de hexametileno	(90%)
Exemplo 31	240	30	N,N'-hexanodiil-di (p-nonilfenil) éster de ácido carbâmico)	(96%)	8,3 ppm	FIG. 17	200	2,0	Diisocianato de hexametileno	(92%)
Exemplo 32	260	30	N,N'-hexanodiil-di ((4-fenilfenill) éster de ácido carbâmico)	(81%)	9,7 ppm	FIG. 17	220	2,0	Diisocianato de hexametileno	(73%)
Exemplo 33	230	25	N,N'-hexanodiil-di (2-naftill) éster de ácido carbâmico)	(93%)	6,5 ppm	FIG. 17	200	1,0	Diisocianato de hexametileno	(89%)
Exemplo 34	230	40	(4-terc-aminofenil) éster de ácido 3-((4-terc-aminofenóxi) carbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico)	(62%)	3,8 ppm	FIG. 18	210	1,3	Diisocianato de isoforona	(57%)
Exemplo 35	245	20	(p-dodecilfenil) éster de ácido 3-((p-dodecilfenóxi) carbonilamino-metil)-	(81%)	9,1 ppm	FIG. 17	230	2,0	Diisocianato de isoforona	(73%)

			3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico)							
Exemplo 36	220	15	(4-cumilfenil) éster de ácido tolueno-2,4-di (carbâmico)	(52%)	8,5 ppm	FIG. 17	200	40,0	diisocianato de 2,4-tolileno	(45%)
Exemplo 37	240	30	(3,5-dimetoxifenil) éster de ácido tolueno-2,4-di (carbâmico)	(88%)	5,4 ppm	FIG. 17	190	0,4	diisocianato de 2,4-tolileno	(82%)
Exemplo 38	230	25	(4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil) éster de ácido tolueno-2,4-di (carbâmico)	(61%)	9,2 ppm	FIG. 17	210	0,8	diisocianato de 2,4-tolileno	(54%)
Exemplo 39	250	40	(1-naftil) éster de ácido N,N'-(4,4'-metanodiil-difenil)-di (carbâmico)	(88%)	7,7 ppm	FIG. 18	250	0,7	diisocianato de 4,4'-difenilmetano	(85%)
Exemplo 40	230	20	(p-heptilfenil) éster de ácido N,N'-(4,4'-metanodiil-difenil-di (carbâmico)	(82%)	6,9 ppm	FIG. 18	260	1,0	diisocianato de 4,4'-difenilmetano	(71%)
Exemplo 41	220	60	(2,4,6-trimetilfenil) éster de ácido N,N'-(4,4'-metanodiil-diciclohexil)-di (carbâmico)	(90%)	8,1 ppm	FIG. 18	240	0,8	diisocianato de 4,4-diciclohexilmetano	(87%)
Exemplo 42	200	80	(4-etoxifenil) éster de ácido N,N'-(4,4'-metanodiil-diciclohexil)-di (carbâmico)	(60%)	3,9 ppm	FIG. 18	250	0,8	diisocianato de 4,4'-diciclohexilmetano	(51%)

[Tabela 13]

Exemplo	Etapa (E)						
	Teor de amônia de mistura recuperada no tanque de armazenamento 208	Amina orgânica (quantidade usada)		Quantidade de uréia adicionada	Solvente adicionado (quantidade usada)		Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído com base na amina orgânica
Exemplo 2	550	HDA	(0,93 kg)	0,96 kg	(não usado)		95%
Exemplo 31	640	HDA	(1,3 kg)	1,93 kg	2,6-dimetil fenol	(3,04 kg)	96%
Exemplo 32	950	HDA	(1,02 kg)	1,00 kg	(não usado)		81%
Exemplo 33	2930	HDA	(1,91 kg)	3,00 kg	Fenol	(2,49 kg)	89%
Exemplo 34	630	IPDA	(1,72 kg)	1,65 kg	1-hexanol	(1,94 kg)	95%
Exemplo 35	590	IPDA	(1,42 kg)	1,59 kg	(não usado)		73%
Exemplo 36	460	TDA	(2,53 kg)	4,26 kg	(não usado)		53%
Exemplo 37	1150	TDA	(1,70 kg)	2,82 kg	2-bromofenol	(9,35 kg)	88%
Exemplo 38	1900	TDA	(1,14 kg)	1,28 kg	(não usado)		61%
Exemplo 39	910	MDA	(1,63 kg)	1,04 kg	(não usado)		88%
Exemplo 41	4890	H-MDA	(1,75 kg)	1,94 kg	2-metil fenol	(0,52 kg)	84%
Exemplo 42	1020	H-MDA	(1,82 kg)	1,24 kg	1-heptanol	(0,96 kg)	61%

[Exemplos 43 a 49]

O mesmo método como no exemplo 3 foi realizado enquanto mudando os compostos e as condições de reação usados. Os compostos e as condições de reação usados na etapa (A) de exemplos 43 a 49 junto com os resultados são mostrados na tabela 14. Além disso, os compostos e as condições de reação usados nas etapas (B) e (D) de exemplos 43 a 49 junto com os resultados são mostrados na tabela 15. Através da "FIG. 17" e "FIG. 18" são indicados na coluna de "Desenho do aparelho" para etapa (F) na tabela 15, "FIG. 17" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 1 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 17. Por outro lado, "FIG. 18" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 4 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 18. Além disso, os compostos e as condições de reação usados na etapa (E) de exemplos 43 a 49 junto com os resultados são mostrados na tabela 16.

[Tabela 14]

Exemplo	Etapa (A)												
	Temp. da coluna de destilação 103 (°C)	Amina orgânica (quantidade usada)		Quantidade de uréia usada	Solvente (quantidade usada)		Taxa de alimentação da amina orgânica	Composto tendo grupos ureído	Conc. de composto tendo grupos ureído	Quantidade residual de NH_3	Composto hidróxi aromático adicionado após a reação (quant. adicion)		Relação comp. hidróxi arom. p/ g. ureído
Exemplo 3	100	HDA	(1,07 kg)	2,49 kg	1-butanol	(13,6 kg)	20 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	10,9% em peso	4300 ppm	p-heptil fenol	(26,6 kg)	7,7
Exemplo 43	120	HDA	(1,06 kg)	1,97 kg	1-butanol	(13,5 kg)	20 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	11,2% em peso	4400 ppm	p-heptil fenol	(26,3 kg)	7,7
Exemplo 44	120	HDA	(1,05 kg)	1,19 kg	1-butanol	(13,4 kg)	20 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	11,7% em peso	4200 ppm	p-heptil fenol	(26,1 kg)	7,7
Exemplo 45	110	HDA	(1,1 kg)	2,44 kg	2,6-dimetil fenol	(11,5 kg)	32 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	13,0% em peso	4200 ppm	4-fenil fenol	(16,1 kg)	10,1
Exemplo 46	120	HDA	(1,02 kg)	2,37 kg	2-fenil etanol	(10,7 kg)	29 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	12,7% em peso	6500 ppm	p-nonil fenol	(29,0 kg)	7,6
Exemplo 47	90	HDA	(1,45 kg)	2,99 kg	Fenol	(9,4 kg)	30 g/min	1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia	18,5% em peso	7300 ppm	2-naftol	(18,0 kg)	9,2
Exemplo 48	120	IPDA	(1,39 kg)	2,11 kg	Monobutil éteretileno glicol	(19,3 kg)	43 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetil ciclohexiluréia	9,1% em peso	4800 ppm	4-terc-amil fenol	(17,4 kg)	6,6
Exemplo 49	120	IPDA	(1,42 kg)	2,15 kg	2-metil fenol	(9,01 kg)	33 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia	17,1% em peso	4200 ppm	4-cumil fenol	(23,1 kg)	11,7

[Tabela 15]

Exemplo	Etapa (B)						Etapa (D)		
	Temp. da coluna de destilação 105 (°C)	Pressão da coluna de destilação 105 (kPa)	Quantidade alimentada (kg)	O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (rendimento com base na amina aromática)		Concentração de amônia no líquido de reação	Quantidade recuperada no tanque de armazenamento 109 (kg)	Teor de composto hidróxi aromático (%)	Teor de uréia (%)
Exemplo 3	240	50	37,8	N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico)	(94%)	8,1 ppm	13,3	89,1	9,1
Exemplo 43	240	30	36,5	N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico)	(93%)	5,8 ppm	12,6	92,4	5,8
Exemplo 44	240	30	35,8	N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico)	(93%)	6,9 ppm	11,9	97,2	0,9
Exemplo 45	240	30	30,6	N,N'-hexanodiil-di (p-nonilfenil) éster de ácido carbâmico)	(96%)	4,7 ppm	7,5	95,1	4,3
Exemplo 46	260	30	16,9	N,N'-hexanodiil-di ((4-fenilfenill) éster de ácido carbâmico)	(93%)	8,8 ppm	3,7	91,2	8,3
Exemplo 47	230	25	18,9	N,N'-hexanodiil-di (2-naftill) éster de ácido	(93%)	6,9 ppm	5,3	90,4	9,1

				carbâmico)					
Exemplo 48	230	40	18,6	(4-terc-amilfenil) éster de ácido 3-(4-terc-amilfenóxi) carbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico)	(95%)	5,8 ppm	20,4	94,4	3,5
Exemplo 49	240	20	23,4	(p-dodecilfenil) éster de ácido 3-((p-dodecilfenóxi) carbonilamino-metil-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico)	(94%)	8,9 ppm	3,4	94,2	5,1

[Tabela 16]

Exemplo	Etapa (F)				
	Desenho do aparelho	Temp. do aparelho de destilação de película fina (°C)	Pressão do aparelho de destilação de película fina (kPa)	Isocianato recuperado (rendimento com base na amina orgânica)	
Exemplo 3	FIG. 17	220	1,3	Diisocianato de hexametileno	(90%)
Exemplo 43	FIG. 17	200	2,0	Diisocianato de hexametileno	(84%)
Exemplo 44	FIG. 17	200	2,0	Diisocianato de hexametileno	(74%)
Exemplo 45	FIG. 17	200	2,0	Diisocianato de hexametileno	(92%)
Exemplo 46	FIG. 17	220	2,0	Diisocianato de hexametileno	(90%)
Exemplo 47	FIG. 17	200	1,0	Diisocianato de hexametileno	(89%)
Exemplo 48	FIG. 18	210	1,3	Diisocianato de isoforona	(90%)
Exemplo 49	FIG. 17	230	2,0	Diisocianato de isoforona	(89%)

[Exemplos 50 a 52]

O mesmo método como no exemplo 4 foi realizado enquanto mudando compostos e condições de reação usados. Os compostos e condições de reação usados na etapa (A) de exemplos 50 a 52 junto com os resultados são mostrados na tabela 17. Além disso, os compostos e as condições de reação usados nas etapas (B) e (D) de exemplos 50 a 52 junto com resultados são vistos na tabela 18. Compostos e condições de reação usados na etapa (C) de exemplos 50 a 52 junto com os resultados são mostrados na tabela 19. As condições de reação de etapa (F) de exemplos 50 a 52 são mostrados na tabela 20. Além disso, a descrição da "FIG. 18" na coluna de "Desenho do aparelho" na tabela 20 indica que um aparelho como na FIG. 18 foi usado para etapa (F).

[Tabela 17]

Exemplo	Etapa (A)								
	Temp. do tanque de agitação 103 (°C)	Quantidade de anilina usada	Quantidade de uréia usada	Composto hidróxi aromático (quantidade usada)		Taxa de alimentação da anilina	Relação de composto hidróxi aromático para no. de moléculas N-feniluréia	Concentração de N-feniluréia	Quantidade residual de NH_3
Exemplo 4	80	1,12 kg	3,61 kg	4-terc-amil fenol	(43,5 kg)	50 g/min	11	4,5% em peso	3800 ppm
Exemplo 50	150	1,14 kg	3,89 kg	2-naftol	(17,6 kg)	60 g/min	5,1	9,7% em peso	5300 ppm
Exemplo 51	130	1,08 kg	2,79 kg	4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol	(23,9 kg)	45 g/min	5,1	7,6% em peso	6700 ppm
Exemplo 52	90	1,21 kg	2,73 kg	p-heptil fenol	(19,9 kg)	40 g/min	4,1	9,7% em peso	9200 ppm

[Tabela 18]

Exemplo	Etapa (B)						Etapa (D)		
	Temp. de coluna recheada 105 (°C)	Pressão de coluna recheada 105 (kPa)	Quantidade alimentada (kg)	Mono (O-aril éster) de ácido carbâmico N-substituído (rendimento com base na amina orgânica)		Concentração de amônia no líquido de reação	Quantidade recuperada no tanque armazenamento 109 (kg)	Teor de composto hidróxi aromático (%)	Teor de uréia (%)
Exemplo 4	200	8	8,95	(4-terc-amilfenil) éster de	(93%)	5,6 ppm	14,7	86,7	13,0

				ácido N-fenil carbâmico					
Exemplo 50	210	15	21,1	(2-naftil) éster de ácido N-fenil carbâmico	(88%)	8,6 ppm	7,9	70,1	28,8
Exemplo 51	230	20	25,3	(4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil) éster de ácido N-fenil carbâmico	(84%)	6,9 ppm	8,6	84,5	15,2
Exemplo 52	220	25	21,2	(p-heptilfenil) éster de ácido N-fenil carbâmico	(86%)	7,7 ppm	7,0	84,3	15,1

[Tabela 19]

Exemplo	Destilação de composto hidróxi aromático		Etapa (C)					Destilação de solvente, substâncias não reagidas, etc.		Adição de composto hidróxi aromático	
	Temp. do tanque de agitação 408 (°C)	Pressão no tanque de agitação 408 (kPa)	Metilal (kg)	Nitrobenzol (kg)	Ácido sulfúrico (kg)	Temp. de reação (°C)	Tempo de reação (h)	Temp. tanque de agitação 408 (°C)	Pressão no tanque de agitação 408 (kPa)	Composto hidróxi aromático adicionado (quantidade adicionada)	
Exemplo 4	160	2	1,14	4,7	5,6	100	10	100	1	4-terc-amil fenol	(5,1 kg)
Exemplo 50	150	1	3,12	7,36	2,23	100	10	100	1	1-naftol	(3,8 kg)
Exemplo 51	150	1	4,05	10,8	2,46	110	8	100	1	4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol	(4,2 kg)
Exemplo 52	150	1	2,63	8,98	2,39	100	15	100	1	p-heptil fenol	(3,8 kg)

[Tabela 20]

Exemplo	Etapa (F)			
	Desenho do aparelho	Temp. de aparelho de destilação de película fina 1002 (°C)	Pressão de aparelho de destilação de película fina 1002 (kPa)	Rendimento de MDI com base em anilina
Exemplo 4	FIG. 18	260	1,5	55%
Exemplo 50	FIG. 18	250	1,0	45%
Exemplo 51	FIG. 18	240	0,8	51%
Exemplo 52	FIG. 18	230	0,1	44%

[Exemplos 53 a 67]

O mesmo método como no exemplo 5 foi realizado enquanto mudando os compostos e as condições de reação usados. Os compostos e as condições de reação usados na etapa (A) de exemplos 53 a 67 junto com os resultados são mostrados na tabelas 21 e 22. Além disso, os compostos e as condições de reação usados nas etapas (R) e (D) de exemplos 53 a 67 junto com os resultados são mostrados na tabelas 23 e 24. Os compostos e as condições de reação usados nas etapas (P) e (F) de exemplos 53 a 67 junto com os resultados são mostrados na tabelas 25 e 26. Através da "FIG. 17" e "FIG. 18" são indicados na coluna de "Desenho do aparelho" para etapa (F) na tabelas 25 e 26, "FIG. 17" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 1 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 17. Por outro lado, "FIG. 18" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 4 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 18. Além disso, os compostos e as condições de reação usados na etapa (E) de exemplos 53 a 67 junto com os resultados são mostrados na tabela 27.

[Tabela 21]

Exemplo	Etapa (A)												
	Temp. reação (°C)	Amina orgânica (quantidade usada)		Quant. uréia usada	Álcool (quantidade usada)		Taxa de aliment amina orgânica	Composto tendo grupos ureído	Conc. composto c/ grupos ureído	Quantidade residual de NH_3	Composto hidróxi aromático adicionado após a reação (quantidade adicionada)		Relação álcool grupos ureído
Exemplo 5	120	IPDA	(0,87 kg)	1,47 kg	1-octanol	(14,6 kg)	10 g/min	3-(ureídometil)-3,3,5-trimetilciclohexiluréia	7,8% em peso	7300 ppm	p-dodecil fenol	(13,4 kg)	11,3
Exemplo 53	100	HDA	(1,11 kg)	2,29 kg	2-fenil etanol	(23,3 kg)	20 g/min	1,6-hexametileno diuréia	7,1% em peso	8800 ppm	4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol	(19,7 kg)	10,3
Exemplo 54	120	HDA	(1,32 kg)	2,73 kg	Monobutil éter etileno glicol	(55,3 kg)	38 g/min	1,6-hexametileno diuréia	3,8% em peso	3600 ppm	2,4-di-terc-amil fenol	(18,7 kg)	15,5
Exemplo 55	120	HDA	(1,28 kg)	2,65 kg	Álcool isodecílico	(29,6 kg)	20 g/min	1,6-hexametileno diuréia	6,5% em peso	3500 ppm	2-naftol	(15,9 kg)	8,8
Exemplo 56	120	HDA	(0,53 kg)	1,15 kg	4-fenil-1-butanol	(54,8 kg)	35 g/min	1,6-hexametileno diuréia	1,1% em peso	4200 ppm	p-dodecil fenol	(29,6 kg)	58
Exemplo 57	110	IPDA	(1,13 kg)	1,87 kg	1-hexanol	(16,9 kg)	30 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia	8,5% em peso	3900 ppm	2-fenil fenol	(11,3 kg)	12,8
Exemplo 58	130	IPDA	(1,29 kg)	1,73 kg	Álcool isodecílico	(41,9 kg)	44 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia	4,2% em peso	3000 ppm	2-naftol	(7,6 kg)	18
Exemplo 59	120	IPDA	(1,68 kg)	2,67 kg)	1-nonanol	(25,6 kg)	30 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia	8,3% em peso	2800 ppm	4-nonil fenol	(26,1 kg)	9,3

[Tabela 22]

Exemplo	Etapa (A)												
	Temp. de reação (°C)	Amina orgânica (quantidade usada)		Quan. uréia usada	Álcool (quantidade usada)		Taxa aliment. amina orgânica	Composto tendo grupos ureído	Conc. de composto c/ grupos ureído	Quant. residual de NH_3	C. hidróxi aromático adicion. após reação (quant. adicionada)		Rel. álcool p/ no. grupos ureído
Exemplo 60	120	IPDA	(1,71 kg)	2,53 kg	Monobutil éter de etileno glicol	(38,3 kg)	38 g/min	3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia	5,9% em peso	1900 ppm	p-dodecil fenol	(34,3 kg)	11,3
Exemplo 61	70	TDA	(1,33 kg)	3,29 kg	2-etil-1-hexanol	(28,4 kg)	65 g/min	2,4-toluenodiuréia	6,5% em peso	3400 ppm	p-heptil fenol	(16,7 kg)	10,7
Exemplo 62	90	TDA	(1,29 kg)	6,34 kg	Ciclohexanol	(21,1 kg)	79 g/min	2,4-toluenodiuréia	7% em peso	7300 ppm	2-fenil fenol	(14,4 kg)	11,0
Exemplo 63	120	TDA	(1,22 kg)	4,79 kg	3-metóxi-3-metil-1-butanol	(23,6 kg)	60 g/min	2,4-toluenodiuréia	4,5% em peso	3500 ppm	p-heptil fenol	(19,2 kg)	11,0
Exemplo 64	120	TDA	(1,28 kg)	3,78 kg	2-fenil etanol	(25,6 kg)	65 g/min	2,4-toluenodiuréia	6,6% em peso	4200 ppm	p-dodecil fenol	(33 kg)	11,0
Exemplo 65	80	MDA	(1,08 kg)	3,23 kg	4-fenil-1-butanol	(24,5 kg)	86 g/min	4,4'-metanodiil difenil diuréia	5,1% em peso	8400 ppm	4-fenil fenol	(9,3 kg)	15,6
Exemplo 66	70	MDA	(1,11 kg)	2,69 kg	Mono-2-etil hexil éter de etileno glicol	(29,1 kg)	65 g/min	4,4'-metanodiil difenil diuréia	4,4% em peso	6300 ppm	2,4-dicumil fenol	(14,8 kg)	16,7
Exemplo 67	120	H-MDA	(1,42 kg)	1,99 kg	Monobutil éter de etileno glicol	(15,9 kg)	44 g/min	4,4'-metanodiil diciclohexil diuréia	9,9% em peso	4400 ppm	2,6-dimetóxi fenol	(10,4 kg)	10,6

[Tabela 23]

Exemplo	Etapa (R)						Etapa (D)		
	Temp. da coluna de destilação 105 (°C)	Pressão (kPa) da coluna destilação 105	Quant. Aliment. (kg)	O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (rendimento com base na amina orgânica)		Concentração de amônia no líquido de reação	Quant. recuperada tanque armazenamento 109 (kg)	Teor álcool (%)	Teor de uréia (%)
Exemplo 5	260	26	15,1	(1-octil) éster de ácido 3-((1-octilóxi) carbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclohexilcarbâmico	(95%)	5,8 ppm	4,4	89,9	9,8
Exemplo 53	240	13	45,2	N,N'-hexanodiil-di ((2-feniléter) éster de ácido carbâmico)	(92%)	9,5 ppm	13,8	90,3	8,4
Exemplo 54	240	15	75,2	N,N'-hexanodiil-di ((2-(2-(butilóxi) etilóxi) etil) éster de ácido carbâmico)	(93%)	8,5 ppm	29,1	94,4	4,6
Exemplo 55	240	15	47,2	N,N'-hexanodiil-di ((isodecilóxi) éster de ácido carbâmico)	(83%)	11,8 ppm	14,7	89,4	8,9
Exemplo 56	240	13	66,8	N,N'-hexanodiil-di ((4-fenilbutil) éster de ácido carbâmico)	(81%)	4,2 ppm	15,1	94,1	4,0
Exemplo 57	220	7	28,5	(4-fenilbutil) éster de ácido 3-((4-fenilbutilóxi) carbonil amino-metil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico	(92%)	7,7 ppm	9,1	91,4	7,6
Exemplo 58	210	8	51,1	isodecil éster de ácido 3-(isodeciloxicarbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico	(89%)	7,4 ppm	21,5	95,4	3,4
Exemplo 59	210	10	53,2	nonil éster de ácido 3-(noniloxicarbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico	(80%)	92 ppm	12,0	85,8	12,1

[Tabela 24]

Exemplo	Etapa (R)						Etapa (D)		
	Temp. da coluna de destilação 105 (°C)	Pressão (kPa) da coluna de destilação 105	Quant. aliment. (kg)	O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (rendimento com base na amina orgânica)		Concentração amônia líquido de reação	Quant. recuperada tanque de armaz. 109 (kg)	Teor de álcool (%)	Teor de uréia (%)
Exemplo 60	220	13	75,6	(2-butilóxi-etil) éster de ácido 3-((2-butilóxi-etilóxi) carbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico	(72%)	108 ppm	16,8	90,5	7,9
Exemplo 61	210	13	45,4	Tolueno-2,4-di ((2-etilhexil) éster de ácido carbâmico)	(84%)	5,3 ppm	16,2	86,5	11,7
Exemplo 62	220	13	41,2	Tolueno-2,4-di ((ciclohexil) éster de ácido carbâmico)	(82%)	6,1 ppm	16,6	65,8	30,2
Exemplo 63	210	26	46,8	Tolueno-2,4-di ((3-metóxi-3-metilbutill) éster de ácido carbâmico)	(69%)	920 ppm	11,7	64,9	28,5
Exemplo 64	220	26	61,5	Tolueno-2,4-di ((p-dodecilfenill) éster de ácido carbâmico)	(62%)	1010 ppm	19,1	76,5	20,4
Exemplo 65	220	13	33,9	N,N'-(4,4'-metanodiil-difenil)-di ((hexil) éster de ácido carbâmico	(83%)	3,9 ppm	14,4	76,4	20,1
Exemplo 66	210	13	45,4	N,N'-(4,4'-metanodiil-difenil)-di ((2-(2-etilhexilóxi) etil) éster ácidocarbâmico)	(81%)	4,5 ppm	16,5	85,5	12,1
Exemplo 67	210	8	27,2	N,N'-(4,4'-metanodiil-diciclohexil)-di ((2-butilóxi) etil éster de ácido carbâmico)	(88%)	7,2 ppm	9,2	86,0	12,2

[Tabela 25]

Exemplo	Etapa (P)						Etapa (F)				
	Catalisador (conc. com base em líquido na matéria prima)		Temp. 502 da coluna destilação (°C)	Pressão (kPa) da coluna de destilação 502	O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (rendimento com base na amina orgânica)		Desenho aparelho	Temp. aparelho destilaçã película fina (°C)	Pressão do aparelho destilação de película fina. (kPa)	Isocianato recuperado (rendimento com base na amina orgânica)	
Exemplo 5	Dilaurato de dibutil estanho	0,5% em peso	260	26	(p-dodecilfenil) éster de ácido 3-((p-dodecilfenóxi) carbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico	(89%)	FIG. 17	220	1,3	Diisocianato de hexametileno	(83%)
Exemplo 53	Dilaurato de dibutil estanho	0,5% em peso	220	20	N,N'-hexanodiil-di ((4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil) éster de ácido carbâmico)	(88%)	FIG. 17	220	1,3	Diisocianato de hexametileno	(83%)
Exemplo 54	Octoato chumbo	0,1% em peso	240	15	N,N'-hexanodiil-di ((2,4-di-terc-amilfenil) éster de ácido carbâmico)	(89%)	FIG. 17	230	2,0	Diisocianato de hexametileno	(83%)
Exemplo 55	Dilaurato de dibutil estanho	0,8% em peso	250	25	N,N'-hexanodiil-di (2-naftill) éster de ácido carbâmico)	(81%)	FIG. 17	230	1,5	Diisocianato de hexametileno	(75%)
Exemplo 56	Dilaurato dibutil	0,8% em peso	240	25	N,N'-hexanodiil-di ((p-dodecilfenil) éster de	(79%)	FIG. 17	230	1,3	Diisocianato hexametileno	(74%)

	estanho				ácido carbâmico)						
Exemplo 57	Acetato de zinco	1,0% em peso	250	40	(2-fenilfenil) éster de ácido 3-((2-fenilfenóxi) carbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico)	(88%)	FIG. 17	230	1,0	Diisocianato de isoforona	(82%)
Exemplo 58	Dilaurato de dibutil estanho	1,4% em peso	230	20	(2-naftil) éster de ácido 3-((p-dodecilfenóxi) carbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico)	(86%)	FIG. 18	240	1,0	Diisocianato de isoforona	(81%)
Exemplo 59	Dilaurato de dibutil estanho	0,8% em peso	230	20	(4-nonilfenil) éster de ácido 3-((4-nonilfenóxi) carbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico)	(78%)	FIG. 17	240	1,2	Diisocianato de isoforona	(73%)

[Tabela 26]

Exemplo	Etapa (P)				Etapa (F)			
	Catalisador (conc. com base em líquido na matéria prima)	Temp. 502 da coluna de destilação (°C)	Pressão (kPa) da coluna de destilação 502	O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (rendimento com base na amina orgânica)	Desenho do aparelho	Temp. do aparelho destilação película fina (°C)	Pressão aparelho destilação de película fina. (kPa)	Isocianato recuperado (rendimento com base na amina orgânica)

Exemplo 60	Dilaurato dibutil estanho	1,0% em peso	230	20	(2-naftil) éster de ácido 3-((2-naftil) carbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico)	(69%)	FIG. 17	240	1,0	Diisocianato de isoforona	(65%)
Exemplo 61	Dilaurato dibutil estanho	1,3% em peso	220	15	Tolueno-2,4-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico)	(79%)	FIG. 17	210	0,8	diisocianato de 2,4-tolileno	(75%)
Exemplo 62	Octoato de chumbo	1,0% em peso	220	25	Tolueno-2,4-di ((2-fenilfenil) éster de ácido carbâmico)	(77%)	FIG. 17	200	0,5	diisocianato de 2,4-tolileno	(73%)
Exemplo 63	Dilaurato dibutil estanho	1,0% em peso	210	10	Tolueno-2,4-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico)	(66%)	FIG. 17	200	0,8	diisocianato de 2,4-tolileno	(62%)
Exemplo 64	Dilaurato dibutil estanho	1,2% em peso	210	10	Tolueno-2,4-di ((p-dodecilfenill) éster de ácido carbâmico)	(59%)	FIG. 17	200	0,8	diisocianato de 2,4-tolileno	(54%)
Exemplo 65	Acetato de zinco	0,9% em peso	240	10	N,N'-(4,4'-metanodiil-difenil)-di ((4-fenilfenil) éster de ácido carbâmico)	(78%)	FIG. 18	270	1,0	diisocianato de 4,4'-difenilmetano	(71%)
Exemplo 66	Dilaurato dibutil estanho	0,9% em peso	240	6	N,N'-(4,4'-metanodiil-difenil)-di ((2,4-dicumilfenil) éster de ácido carbâmico	(75%)	FIG. 17	280	1,5	diisocianato de 4,4'-difenilmetano	(69%)
Exemplo	Acetato	1,0%	200	20	N,N'-(4,4'-metanodiil-diciclohexi	(80%)	FIG. 18	250	0,5	diisocianato de	(74%)

67	de zinco	em peso			l)-di ((2,6-dimetoxifenil) éster de ácido carbâmico					4,4'-diciclohexil metano	

[Tabela 27]

Exemplo	Etapa (E)						
	Teor de amônia de mistura recuperada no tanque de armazenamento 109	Amina orgânica (quantidade usada)		Quantidade de uréia adicionada	Solvente adicionado (quantidade adicionada)		Rendimento de O-aril éster ácido carbâmico N-subst. com base amina orgânica
Exemplo 5	1300	IPDA	(0,87 kg)	0,70 kg	1-octanol	(7,57 kg)	95%
Exemplo 53	1320	HDA	(1,21 kg)	1,40 kg	2-fenil etanol	(13,0 kg)	83%
Exemplo 54	1400	HDA	(1,32 kg)	1,46 kg	Dimonobutil éter de etileno glicol	(27,8 kg)	83%
Exemplo 57	1200	IPDA	(1,22 kg)	0,98 kg	1-hexanol	(10,0 kg)	82%
Exemplo 58	1100	IPDA	(1,29 kg)	0,94 kg	Álcool isodecílico	(21,3 kg)	81%
Exemplo 61	520	TDA	(1,18 kg)	1,13 kg	2-etil-1-hexanol	(11,1 kg)	75%
Exemplo 62	1320	TDA	(1,52 kg)	2,72 kg	Ciclohexanol	(14,1 kg)	73%
Exemplo 65	950	MDA	(1,28 kg)	1,90 kg	4-fenil-1-butanol	(18,1 kg)	71%
Exemplo 66	710	MDA	(1,10 kg)	0,79 kg	Mono-2-etil hexil éter etilenoglicol	(15,0 kg)	69%
Exemplo 67	550	H-MDA	(1,42 kg)	0,91 kg	Monobutil éter de etileno glicol	(8,01 kg)	74%

[Exemplos 68 a 70]

O mesmo método como no exemplo 6 foi realizado enquanto mudando os compostos e as condições de reação usados. Os compostos e as condições de reação usados na etapa (A) de exemplos 68 a 70 junto com os resultados são mostrados na tabela 28. Além disso, os compostos e as condições de reação usados nas etapas (R) e (D) de exemplos 68 a 70 junto com os resultados são mostrados na tabela 29. Os compostos e as condições de reação usados na etapa (P) de exemplos 68 a 70 junto com os resultados são mostrados na tabela 30. Os compostos e as condições de reação usados na etapa (C) de exemplos 68 a 70 junto com os resultados são mostrados na tabela 31. Os compostos e as condições de reação usados na etapa (F) de exemplos 68 a 70 junto com os resultados são mostrados na tabela 32. Através da "FIG. 17" e "FIG. 18" são indicados na coluna de "Desenho do aparelho" para etapa (F) na tabela 32, "FIG. 17" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 1 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 17. Por outro lado, "FIG. 18" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 4 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 18.

[Tabela 28]

Exemplo	Etapa (A)										
	Temp. do tanque de agitação 103. (°C)	Quantidade de anilina usada	Quantidade de uréia usada	Solvente (quantidade usada)		Taxa de alimentação da amina orgânica	Concentração de composto tendo grupos ureído	Quantidade residual de NH_3	Composto hidróxi aromático adicionado após a reação (quantidade adicionada)		Relação álcool p/ no. grupos ureído
Exemplo 6	90	(1,08 kg)	3,34 kg	1-nonanol	(33,5 kg)	12 g/min	5,6% em peso	7900 ppm	2-fenil fenol	(25,9 kg)	10,1
Exemplo 68	150	(1,22 kg)	6,53 kg	2-fenil etanol	(28,8 kg)	30 g/min	4,7% em peso	5300 ppm	4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol	(27,0 kg)	9,6
Exemplo 69	130	(1,32 kg)	8,51 kg	Monobutil éter de etileno glicol	(41,9 kg)	35 g/min	3,6% em peso	6700 ppm	p-heptil fenol	(16,4 kg)	13,3
Exemplo 70	90	(0,98 kg)	5,69 kg	3-metóxi-3-metil-1-butanol	(31,1 kg)	25 g/min	3,6% em peso	9200 ppm	4-etoxi fenol	(14,5 kg)	13,4

[Tabela 29]

Exemplo	Etapas (R) e (D)			
	Temp. da coluna recheada 105. (°C)	Pressão (kPa) da coluna recheada 105	Mono (-O-alquil éster) de ácido carbâmico N-substituído (rendimento com base na amina orgânica)	
Exemplo 6	210	50	Nonil éster de ácido N-fenil-carbâmico	(91%)

Exemplo 68	220	50	(2-feniletil éster) de ácido N-fenil-carbâmico	(88%)
Exemplo 69	172	100	(2-(1-butilóxi) etil éster de ácido N-fenil-carbâmico	(88%)
Exemplo 70	175	100	((3-metóxi-3-metilbutil) éster de ácido N-fenil-carbâmico)	(85%)

[Tabela 30]

Exemplo	Etapa (P)					
	Catalisador (conc. com base em líquido na matéria prima)		Temp. de reação (°C)	Pressão (kPa)	Mono (-O-aril éster) de ácido carbâmico N-substituído (rendimento com base na amina orgânica)	
Exemplo 6	Dilaurato de dibutil estanho	0,5% em peso	260	26	(2-fenilfenil éster de ácido N-fenil-carbâmico)	(89%)
Exemplo 68	Dilaurato de dibutil estanho	0,2% em peso	250	20	(4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) feniléster de ácido N-fenil-carbâmico)	(83%)
Exemplo 69	Octoato de chumbo	0,2% em peso	240	10	(p-heptilfeniléster de ácido N-fenil-carbâmico)	(81%)
Exemplo 70	Acetato de zinco	0,2% em peso	220	60	(4-etoxifeniléster de ácido N-fenil-carbâmico)	(82%)

[Tabela 31]

Exemplo	Destilação de composto hidróxi aromático		Etapa (C)					Destilação de solvente, substâncias não reagidas, etc.		Adição de composto hidróxi aromático	
	Temp. do tanque de agitação 408. (°C)	Pressão (kPa) do tanque de agitação 408	Metilal (kg)	Nitrobenzol (kg)	Ácido sulfúrico (kg)	Temp. de reação (°C)	Tempo de reação (h)	Temp. do tanque de agitação 408. (°C)	Pressão (kPa) tanque agit. 408	Composto hidróxi aromático adicionado (quantidade adicionada)	
Exemplo 6	160	1	2,04	1,94	1,02	90	24	90	1	2-fenil fenol	(25,9 kg)
Exemplo 68	150	1	0,76	2,11	0,39	100	10	100	1	4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol	(3,5 kg)
Exemplo 69	150	1	0,64	2,14	0,62	110	8	100	1	p-heptil fenol	(5,4 kg)
Exemplo 70	150	1	2,63	8,98	2,39	100	15	100	1	4-etoxi fenol	(5,8 kg)

[Tabela 32]

Exemplo	Etapa (F)			
	Desenho do aparelho	Temp. do aparelho de destilação de película fina 1002 (°C)	Pressão (kPa) do aparelho de destilação de película fina 1002	Rendimento de MDI com base em anilina
Exemplo 6	FIG. 18	260	1,5	91%
Exemplo 68	FIG. 18	250	1,0	43%
Exemplo 69	FIG. 18	240	0,8	50%
Exemplo 70	FIG. 18	230	0,1	47%

[Exemplos 71 a 73]

O mesmo método como no exemplo 7 foi realizado enquanto mudando os compostos e as condições de reação usados. Os compostos e as condições de reação usados na etapa (A) de exemplos 71 a 73 junto com os resultados são mostrados na tabela 33. Além disso, os compostos e as condições de reação usados nas etapas (R) e (D) de exemplos 71 a 73 junto com os resultados são mostrados na tabela 34. Os compostos e as condições de reação usados na etapa (C) de exemplos 71 a 73 junto com os resultados são mostrados na tabela 35. As condições de reação usadas nas etapas (P) e (F) de exemplos 71 a 73 junto com os resultados são mostrados na tabela 36. Através da "FIG. 18" é indicado na coluna de "Desenho do aparelho" para etapa (F) na tabela 36, "FIG. 18" indica que o mesmo método como na etapa (F) de exemplo 4 foi realizado usando um aparelho como mostrado na FIG. 18.

[Tabela 33]

Exemplo	Etapa (A)										
	Temp. da coluna de destilação 105 (°C)	Quantidade de anilina usada (kg)	Quantidade de uréia usada (kg)	Solvente (quantidade adicionada)		Taxa de alimentação da amina orgânica	Conc. de composto tendo grupos ureído	Quantidade residual de NH_3	Composto hidróxi adicionado após a reação (quantidade adicionada)		Relação álcool p/ no. de grupos ureído
Exemplo 7	90	(1,13 kg)	3,50 kg	1-heptanol	(25,4 kg)	18 g/min	7,4% em peso	8300 ppm	2,4-di-terc-amil fenol	(24,4 kg)	9,0
Exemplo 71	100	(1,53 kg)	9,87 kg	1-heptanol	(47,7 kg)	30 g/min	3,6% em peso	4200 ppm	Fenol	(4,6 kg)	13,4
Exemplo 72	120	(1,39 kg)	8,96 kg	Fenol	(16,9 kg)	40 g/min	7,3% em peso	3800 ppm	4-fenil-1-butanol	(22,4 kg)	5,4
Exemplo 73	90	(1,29 kg)	8,32 kg	Ciclohexanol	(34,7 kg)	30 g/min	4,1% em peso	5500 ppm	2-isopropil fenol	(7,6 kg)	13,4

[Tabela 34]

Exemplo	Etapas (R) e (D)		
	Temp. da coluna de destilação 105 (°C)	Mono (-O-alquil) éster de ácido carbâmico N-substituído (rendimento com base na amina orgânica)	
Exemplo 7	190	(1-heptil) éster de ácido N-fenil carbâmico	(90%)
Exemplo 71	240	(1-heptil) éster de ácido N-fenil	(85%)

		carbâmico	
Exemplo 72	240	(4-fenilbutil) éster de ácido N-fenil carbâmico	(76%)
Exemplo 73	220	Ciclohexil éster de ácido N-fenil carbâmico	(84%)

[Tabela 35]

Exemplo	Destilação do composto hidróxi		Etapa (C)					Destilação do composto hidróxi		Adição de composto hidróxi aromático	
	Temp. do tanque de agitação 408 (°C)	Pressão (kPa) do tanque de agitação 408	Metilal (kg)	Nitrobenzol (kg)	Ácido sulfúrico (kg)	Temp. de reação (°C)	Tempo reação (h)	Temp. do tanque de agitação 408. (°C)	Pressão (kPa) tanque agitação 408	Composto hidróxi aromático adicionado (quantidade adicionada)	
Exemplo 7	160	1	1,30	7,34	1,33	100	10	100	1	2,4-di-terc-amil fenol	(24,2 kg)
Exemplo 71	150	1	0,72	2,4	0,96	100	10	100	1	4-terc-amil fenol	(16,8 kg)
Exemplo 72	150	1	1,13	3,76	1,5	110	8	100	1	2,4-di-terc-amil fenol	(26,2 kg)
Exemplo 73	150	1	0,75	2,5	0,86	110	9	100	1	2,6-dimetóxi fenol	(15,9 kg)

[Tabela 36]

Exemplo	Etapa (P)				Etapa (F)			
	Catalisador (conc. com base em líquido na matéria prima)		Temp. de reação (°C)	Pressão (kPa)	Desenho do aparelho	Temp. do aparelho destilação de película fina 1002 (°C)	Pressão (kPa) aparelho destilação película fina 1002	Rendimento de MDI com base em anilina
Exemplo 7	Dilaurato de dibutil estanho	0,5% em peso	250	30	FIG. 18	250	1,0	47%
Exemplo 71	Dilaurato de dibutil estanho	1,2% em peso	250	50	FIG. 18	250	1,0	46%
Exemplo 72	Octoato de chumbo	1,2% em peso	220	20	FIG. 18	230	0,8	40%
Exemplo 73	Acetato de zinco	1,0% em peso	230	15	FIG. 18	220	0,1	49%

[Exemplo 74]

Etapa (74-1): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho mostrado na FIG. 19 foi usado.

2,54 kg de uréia foram transferidos a partir de um tanque de armazenamento 1100 para um tanque de agitação 1103 com uma linha B3 fechada. Após fundir a uréia por aquecimento do tanque de agitação 1103 a 150°C, 0,820 kg de hexametilenodiamina foram alimentados na taxa de cerca de 10 g/min a partir de um tanque de armazenamento 1101 no tanque de agitação 1103 via uma linha A1 enquanto agitando o tanque de agitação 1103. Após completar a alimentação de hexametilenodiamina, a agitação foi continuada durante cerca de 1 hora e cerca de 8,5 kg de água foram colocados no tanque de agitação 1103 a partir de um tanque de armazenamento 1102 para formar uma solução de tipo suspensão. A solução de tipo suspensão foi alimentada em um aparelho de filtração pressurizado 1104 e o componente sólido foi separado por filtração. Quando o componente sólido recuperado foi analisado por ^{1}H-RMN, foi verificado conter um composto tendo grupos ureileno. Cerca de 50 kg de água a cerca de 80°C foi adicionada no componente sólido seguido por agitação para obter uma dispersão, e a dispersão foi filtrada para obter um filtrado. Um componente sólido que foi precipitado após resfriamento do filtrado foi separado e recuperado. O componente sólido recuperado foi aquecido a cerca de 100°C e secado com um secador contendo uma atmosfera de nitrogênio para obter 125 g de um sólido. Quando o sólido foi analisado por ^{1}H-RMN, foi encontrado para ser 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia. O procedimento acima mencionado foi então repetido 10 vezes para obter cerca de 1270 g de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia.

Etapa (B): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 20 foi usado.

O 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia obtido na etapa (74-1) e 25,9 kg de 4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol foram misturados para obter uma solução de matéria prima que foi colocada em um tanque de armazenamento 1201.

Uma coluna 1202 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a 240°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 26 kPa. A solução de matéria prima acima mencionada foi alimentada na taxa de cerca de 3,5 g/min de uma linha C1 provida na coluna recheada 1202. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentada após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 23,2 kg. O líquido de reação foi recuperado em um tanque de armazenamento 1205 através de uma linha C4 provida no fundo da coluna recheada 1202. Um componente de fase gasosa foi extraído de uma linha C2 provido no topo da coluna recheada 1202 e condensado com um condensador 1203, e o componente de fase líquida resultante foi circulado na coluna recheada 1202 via um separador de gás líquido 1204. Por outro lado, amônia foi recuperada na forma de um componente gasoso do separador de gás líquido 1204. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 1205 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 86%.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

Um aparelho de destilação de película fina 602 tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 220°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,3 kPa. O

líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 na etapa (B) foi colocado em um tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1800 g/h via uma linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provido no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado em um tanque de armazenamento 603. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 602 através de uma linha 63. Um componente gasoso contendo diisocianato de hexametileno e p-heptil fenol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O componente gasoso foi introduzido em uma coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. O componente gasoso foi condensado no condensador 610 via uma linha 69 e recuperado em um tanque de armazenamento 612 através de um separador de gás líquido 611.

Quando o líquido condensado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base em hexametileno diamina foi cerca de 80%.

[Exemplo 75]

Etapa (75-1): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (74-1) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar 3,41 kg de uréia e 1,11 kg de hexametilenodiamina. O mesmo procedimento foi então repetido 10 vezes e o 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia resultante foi misturado com cerca de 25,6 kg de

4-etoxi fenol e obter uma solução homogênea. Quando a solução foi analisada por ^{1}H-RMN, foi encontrada para ser uma solução contendo 6,3% em peso de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia e 7,7% em peso de uréia.

Etapa (B): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 20 foi usado.

A solução obtida na etapa (75-1) foi transferida para o tanque de armazenamento 401.

A coluna recheada 1202 foi aquecida a 240°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 26 kPa. A solução obtida na etapa (75-1) foi alimentada na taxa de cerca de 3,7 g/min de uma linha 41 provida na coluna recheada 1202. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentada após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 24,3 kg. O líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 1205 através de uma linha 44 provida no fundo da coluna recheada 1202. Um componente de fase gasosa foi extraído de uma linha C2 provido no topo da coluna recheada 1202 e condensado com o condensador 1203 mantido a cerca de 85°C, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado em um tanque de armazenamento 1207 via o separador de gás líquido 1204. Por outro lado, amônia foi recuperada na forma de um componente gasoso do separador de gás líquido 1204. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 1205 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((4-etoxifenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((4-etoxifenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 93%. A quantidade de solução recuperada no tanque de armazenamento 1207 foi de 16,1 kg, e quando a solução foi analisada por ^{1}H-RMN, foi encontrada para

conter 11,6% em peso de uréia.

[Exemplo 76]

Etapa (76-1): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (74-1) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar 3,33 kg de uréia e usando 1,18 kg de 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina em vez de hexametilenodiamina. O mesmo procedimento foi então repetido 10 vezes para obter 1,53 kg de um sólido. Quando o sólido foi analisado por ^{1}H-RMN, foi encontrado para ser 3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexil uréia.

Etapa (B): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O sólido obtido na etapa (76-1) foi misturado com 21,3 kg de p-heptil fenol para obter uma solução de matéria prima foi colocado no tanque de armazenamento 401.

O mesmo procedimento como no exemplo (56-2) foi realizado com a exceção de alimentar a solução de matéria prima na taxa de cerca de 2,8 g/min. A quantidade de líquido de reação alimentada após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 19,7 kg. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 405 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter (p-heptilfenil) éster de ácido 3-((p-heptilfenóxi) carbonilamino-metil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico), e o rendimento de (p-heptilfenil) éster de ácido 3-((p-heptilfenóxi) carbonilamino-metil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico) com base em 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foi cerca de 83%.

[Exemplo 77]

Etapa (77-1): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho mostrado na FIG. 19 foi usado.

3,01 kg de uréia a partir do tanque de armazenamento 1100 e 5,21

kg de água a partir do tanque de armazenamento 1102 foram transferidos no tanque de agitação 1103 com a linha B3 fechada. O tanque de agitação 1103 foi aquecido a 90°C para obter uma solução homogênea, e 0,970 kg de hexametilenodiamina foram alimentados na taxa de cerca de 8 g/min a partir do tanque de armazenamento 1101 no tanque de agitação 1103 via a linha B1 enquanto agitando o tanque de agitação 1103. Após completar a alimentação de hexametilenodiamina, a agitação foi continuada durante cerca de 1 hora. Uma solução de tipo suspensão foi obtida. A solução de tipo suspensão foi alimentada no aparelho de filtração pressurizado 1104 e o componente sólido foi separado por filtração. O filtrado recuperado foi resfriado a cerca de 20°C e um componente sólido que foi precipitado foi separado por filtração e recuperado. O componente sólido foi aquecido a cerca de 100°C e secado com um secador contendo uma atmosfera de nitrogênio para obter 0,32 kg de um sólido. Quando o sólido foi analisado por ^{1}H-RMN, foi encontrado para ser 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia. O procedimento acima mencionado foi então repetido 5 vezes para obter cerca de 1,48 kg de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia.

Etapa (B): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 20 foi usado.

O 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia obtido na etapa (77-1) e 15,6 kg de 4-cumil fenol foram misturados para obter uma solução de matéria prima que foi colocado no tanque de armazenamento 1201.

A coluna recheada 1202 foi aquecida a 240°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 26 kPa. A solução de matéria prima acima mencionada foi alimentada na taxa de cerca de 3,5 g/min de uma linha C1 provida na coluna recheada 1202. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentada após a reação ter alcançado um estado uniforme

foi cerca de 15,6 kg. O líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 406 através de uma linha C4 provida no fundo da coluna recheada 1202. Um componente de fase gasosa foi extraído de uma linha C2 provido no topo da coluna recheada 402 e condensado com um condensador 1203, e o componente de fase líquida resultante foi circulado na coluna recheada 1202 via um separador de gás líquido 1204. Por outro lado, amônia foi recuperada na forma de um componente gasoso do separador de gás líquido 1204. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 1205 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((4-cumilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((4-cumilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 83%.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

Um aparelho de destilação de película fina 602 tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 220°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurado a cerca de 1,3 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 na etapa (B) foi colocado em um tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1800 g/h via uma linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado em um tanque de armazenamento 603. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 602 através de uma linha 63. Um componente gasoso contendo diisocianato de hexametileno e 4-cumilfenol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O

componente gasoso foi introduzido em uma coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa.

Quando o líquido condensado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base em hexametileno diamina foi cerca de 80%.

[Exemplo 78]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 1 foi realizado com a exceção de usar 34,3 kg de p-heptil fenol, 2,92 kg de uréia e 1,38 kg de hexametilenodiamina. Após completar a reação, o líquido de reação foi amostrado, e como um resultado de analisar o líquido de reação por cromatografia líquida, foi verificado conter 6,1% em peso de um composto tendo grupos ureído na forma de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia. Além disso, a concentração de amônia na solução foi de 5500 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados. A relação do número de moléculas de p-heptil fenol para o número de grupos ureído foi de 7,7.

A linha 13 foi então aberta e o líquido de reação foi transferido para o tanque de armazenamento 104 via a linha 13.

Etapa (B): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 13 foi usado.

A coluna recheada 105 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a 240°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 26 kPa. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado

na taxa de cerca de 1,5 g/min a partir da linha 14 provido na coluna recheada 105. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentado após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 36,3 kg. O líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 110 através da linha 16 provida no fundo da coluna recheada 105. Um componente de fase gasosa foi condensado no condensador 106 mantido a cerca de 85°C a partir da linha 15 provido no topo da coluna recheada 105, e o componente de fase líquida resultante foi circulado na coluna recheada 105 via o separador de gás líquido 108. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi de 35,9 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) e uréia. O rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 89%.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

Um aparelho de destilação de película fina 602 tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 220°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,3 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 na etapa (B) foi colocado em um tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1800 g/h via uma linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado em um tanque de armazenamento 603. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de

película fina 602 através de uma linha 63. Um componente gasoso contendo diisocianato de hexametileno e p-heptil fenol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O componente gasoso foi introduzido em uma coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. O componente de fase gasosa foi condensado em um condensador 610 via uma linha 69 e recuperado em um tanque de armazenamento 612 através de um separador de gás líquido 611.

Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base na amina orgânica (hexametileno diamina) foi cerca de 79%.

[Exemplo 79]

Etapas (A) e (B): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 21 foi usado.

1,31 kg de hexametilenodiamina e 3,39 kg de uréia foram misturados em 3,5 kg de água para obter uma solução aquosa homogênea. A solução aquosa foi colocada em um tanque de armazenamento 1300. Uma porção de uma coluna de destilação 1302 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) acima uma linha D1 foi aquecida a 200°C, enquanto uma porção da coluna de destilação 1302 abaixo a linha D1 foi aquecida a 240°C, e a solução aquosa no tanque de armazenamento 1300 foi alimentada na taxa de cerca de 1,6 g/min de uma linha D0 enquanto alimentando gás nitrogênio na taxa de 0,1 N L/min de uma linha D6. Além disso, 4-(1,1,3,3-tetrametilbutil)

fenol foi alimentado de uma linha 1301 na taxa de cerca de 16,1 g/min. Quando o líquido de reação foi amostrado a partir da linha de amostragem D5 provida acima a linha D1 e analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia líquida, o líquido de reação foi verificado conter 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia. Além disso, em uma análise do líquido de reação, os compostos tendo grupos amino (como hexametilenodiamina ou 6-ureído-hexametilenoamina) não foram detectados.

O líquido de reação foi recuperado em um tanque de armazenamento 1305 de uma linha D4 provida no fundo da coluna de destilação 1302. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 1305 foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia líquida, o líquido de reação foi encontrado para ser uma solução contendo N,N'-hexanodiil-di ((4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil) éster de ácido carbâmico). O rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi de 78%.

[Exemplo 80]

Etapas (A) e (R): Produção de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 21 foi usado.

1,25 kg de hexametilenodiamina e 3,23 kg de uréia foram misturados em 3,3 kg de água para obter uma solução aquosa homogênea. A solução aquosa foi colocada no tanque de armazenamento 1300. Uma porção da coluna de destilação 1302 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) acima a linha D1 foi aquecida a 200°C, enquanto uma porção da coluna de destilação 1302 abaixo a linha D1 foi aquecida a 240°C, e a solução aquosa no tanque de armazenamento 1300 foi alimentada na taxa de cerca de 1,55 g/min de uma linha D0 enquanto alimentando gás nitrogênio na taxa de 0,1 N L/min de uma linha D6. Além disso, 2-fenil etanol foi alimentado a partir da linha 1301 na taxa de cerca de 9,13 g/min. Quando o líquido de reação foi

amostrado a partir da linha de amostragem D5 provida acima a linha D1 e analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia líquida, o líquido de reação foi verificado conter 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia. Além disso, em uma análise do líquido de reação, os compostos tendo grupos amino (como hexametilenodiamina ou 6-ureído-hexametilenoamina) não foram detectados.

O líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 1305 de uma linha D4 provida no fundo da coluna de destilação 1302. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 1305 foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia líquida, o líquido de reação foi encontrado para ser uma solução contendo N,N'-hexanodiil-di ((2-feniléter) éster de ácido carbâmico). O rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((2-feniléter) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi de 75%.

Etapa (P): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por reação de transesterificação

O aparelho mostrado na FIG. 16 foi usado.

20,7 kg de p-heptil fenol foram adicionados no líquido de reação obtido na etapa acima para obter uma solução homogênea que foi colocada no tanque de armazenamento 501.

A coluna recheada 502 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a 260°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 26 kPa. A mistura no tanque de armazenamento 501 foi alimentada na taxa de cerca de 2,3 g/min de uma linha 51 provida na coluna recheada 502. Um líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 505 via a linha 54 provida no fundo da coluna recheada 502. Um componente de fase gasosa foi introduzido no condensador 503 de uma linha 52 provido no topo da coluna recheada 502, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado no tanque de armazenamento 504 através do separador de gás líquido 507. Quando o líquido de reação recuperado no tanque

de armazenamento 505 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi encontrado para ser uma solução contendo N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi de 71%.

[Exemplo 81]

Etapa (G): Etapa de regeneração de uréia

Exemplo 1 foi repetido e amônia obtida a partir das linhas 19 e 17 nas etapas (A) e (B) foi recuperado na forma de amônia líquida usando um aparelho de liquefação.

Amônia pressurizada a 17,6 MPa, aquecida a 150°C e alimentada na taxa de 3,44 kg/h, dióxido de carbono pressurizado a 17,6 MPa e alimentado na taxa de 2,20 kg/h e um condensado a ser descrito a seguir foram alimentados em um tubo de síntese de uréia 1401 e reagido a 190°C.

O líquido de síntese de uréia que aparecer a partir do tubo de síntese de uréia foi alimentado em um separador de pressão elevada 1402, enquanto dióxido de carbono simultaneamente alimentado de uma linha 21 foi contatado com o líquido de síntese de uréia na taxa de 2,20 kg/h para decompor os produtos não convertidos a 195°C seguido por separar uma mistura gasosa contendo amônia a 4,26 kg/h, dióxido de carbono a 2,43 kg/h e água a 0,50 kg/h a partir de uma solução aquosa de uréia contendo uréia a 6,0 kg/h, amônia a 2,88 kg/h, dióxido de carbono a 2,34 kg/h e água a 3,01 kg/h. A solução aquosa de uréia foi despressurizada a 1,76 MPa e então 0,20 MPa para separar produtos residuais não convertidos, e então submetida para tratamento final para obter uréia na taxa de 6,0 kg/h. Os produtos separados não convertidos foram absorvidos com água para obter uma solução aquosa de carbamato de amônia a 1,76 MPa contendo amônia a 2,84 kg/h, dióxido de carbono a 2,34 kg/h e água a 1,21 kg/h.

A mistura gasosa foi então alimentada em um condensador 1403 para aspirar e pressurizar a solução aquosa de carbamato de amônia pressurizada a 17,6 MPa. O condensado resultante foi recirculado para o tubo de síntese de uréia 1401.

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído usando uréia produzida na etapa (G)

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 1 foi realizado com a exceção de usar 40,0 kg de p-heptil fenol, 3,33 kg da uréia produzida na etapa (G) acima e 1,61 kg de hexametilenodiamina. O líquido de reação continha 6,3% em peso de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia. Além disso, a concentração de amônia na solução foi de 6300 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O mesmo método como na etapa (B) de exemplo 1 foi realizado com a exceção de usar a solução obtida na etapa (A) acima seguida por recuperação do líquido de reação no tanque de armazenamento 110. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 97%.

[Exemplo 82]

Etapa (G): Etapa de regeneração de uréia

O aparelho mostrado na FIG. 22 foi usado.

Exemplo 5 foi repetido e a amônia obtida a partir das linhas 19 e 17 nas etapas (A) e (R) foi recuperada na forma de amônia líquida usando um aparelho de liquefação.

Amônia pressurizada a 17,6 MPa, aquecida a 150°C e alimentada

na taxa de 3,44 kg/h, dióxido de carbono pressurizado a 17,6 MPa e alimentada na taxa de 2,20 kg/h e um condensado a ser descrito a seguir foram alimentados no tubo de síntese de uréia 1401 e reagido a 190°C.

O líquido de síntese de uréia que aparecer a partir do tubo de síntese de uréia foi alimentado em um separador de pressão elevada 1402, enquanto dióxido de carbono simultaneamente alimentado de uma linha 21 foi contatado com o líquido de síntese de uréia na taxa de 2,20 kg/h para decompor os produtos não convertidos a 195°C seguido por separar uma mistura gasosa contendo amônia a 4,26 kg/h, dióxido de carbono a 2,43 kg/h e água a 0,50 kg/h a partir de uma solução aquosa de uréia contendo uréia a 6,0 kg/h, amônia a 2,88 kg/h, dióxido de carbono a 2,34 kg/h e água a 3,01 kg/h. A solução aquosa de uréia foi despressurizada a 1,76 MPa e então 0,20 MPa para separar produtos residuais não convertidos, e então submetida para tratamento final para obter uréia na taxa de 6,0 kg/h. Os produtos separados não convertidos foram absorvidos com água para obter uma solução aquosa de carbamato de amônia a 1,76 MPa contendo amônia a 2,84 kg/h, dióxido de carbono a 2,34 kg/h e água a 1,21 kg/h.

A mistura gasosa foi então alimentada no condensador 1403 para aspirar e pressurizar a solução aquosa de carbamato de amônia pressurizada a 17,6 MPa. O condensado resultante foi recirculado para o tubo de síntese de uréia 1401.

Etapa (A): Produção de éster de ácido carbâmico N-substituído usando uréia regenerada na etapa (G)

Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 5 foi realizado com a exceção de usar 14,6 kg de 1-octanol, 1,47 kg da uréia produzida na etapa (G) acima e 0,87 kg de 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina. Como um resultado de analisar o líquido de reação resultante por cromatografia

líquida, foi verificado conter cerca de 7,8% em peso de 3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia. Além disso, a concentração de amônia na solução foi de 7300 ppm. 13,4 kg de um composto hidróxi aromático na forma de p-dodecil fenol foram adicionados a partir do tanque de armazenamento 101 para obter uma solução homogênea. Linha 13 foi então aberta e a solução foi transferida para o tanque de armazenamento 104 via a linha 13.

Etapas (R) e (D): Produção de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O mesmo método como nas etapas (R) e (D) de exemplo 4 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação obtido na etapa (A) que usou a uréia regenerada acima descrita. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi de 8,80 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter (1-octil) éster de ácido 3-((1-octilóxi) carbonilamidometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico), e o rendimento com base em 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foi cerca de 95%.

Etapa (P): Reação de transesterificação

O mesmo método como na etapa (P) de exemplo 4 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação obtido nas etapas (R) e (D) acima. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 505 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi encontrado para ser uma solução contendo (p-dodecilfenil) éster de ácido 3-((p-(dodecilfenóxi) carbonilaminometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico), e o rendimento com base em 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foi de 89%.

[Exemplo 83]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 1 foi realizado com a exceção de usar 1,33 kg de hexametilenodiamina, 3,09 kg de uréia, 28,1 kg de 2-naftol em vez de p-heptil fenol e aquecer o tanque de armazenamento 103 a 120°C.

Um líquido de reação foi obtido que continha 7,2% em peso de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia e 6100 ppm de amônia.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O mesmo método como nas etapas (B) e (D) de exemplo 1 foi realizado com a exceção de aquecer a coluna recheada 105 a 240°C, configurando a pressão interna a 15 kPa e usando o líquido de reação obtido na etapa (A) acima.

Um líquido de reação foi obtido que continha N,N'-hexanodiil-di (2-naftill) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di (2-naftill) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 97%. A concentração de amônia no líquido de reação foi cerca de 8 ppm.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

O aparelho de destilação de película fina 602 foi aquecido a 220°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,0 kPa. O líquido de reação obtido na etapa (B) acima foi colocado no tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1800 g/h via a linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado no tanque de armazenamento 603 (o componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 não foi

alimentado no aparelho de destilação de película fina 602). Cerca de 15,2 kg de uma solução foram obtidos no tanque de armazenamento 603. Um componente gasoso contendo diisocianato de hexametileno e 2-naftol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O componente gasoso foi introduzido na coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado na coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. O componente de fase gasosa foi condensado no condensador 610 via a linha 69 e recuperado no tanque de armazenamento 612 através do separador de gás líquido 611.

Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno.

Etapa (A-2): Re-uso de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído não sofrendo a decomposição térmica

Quando a solução recuperada no tanque de armazenamento 603 na etapa (F) acima foi analisada por cromatografia líquida, foi encontrada para ser uma mistura contendo N,N'-hexanodiil-di (2-naftill) éster de ácido carbâmico) e 2-naftol.

O mesmo método como na etapa (A) acima foi realizado com a exceção de usar uma mistura de cerca de 5,9 kg da mistura e 22,2 kg de 2-naftol em vez de 2-naftol, 1,33 kg de hexametilenodiamina e 3,22 kg de uréia. Um líquido de reação foi obtido que continha 7,2% em peso de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia e 6300 ppm de amônia.

[Exemplo 84]

Etapa (B-2): Re-uso de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído não sofrendo a decomposição térmica

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 83 foi realizado para obter cerca de 32,1 kg de uma solução contendo 7,2% em peso de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia.

6,0 kg da mistura recuperada no tanque de armazenamento 603 na etapa (F) acima foram adicionados a esta solução para obter uma mistura seguido por realização do mesmo método como na etapa (B) acima usando esta mistura. Um líquido de reação foi obtido que continha N,N'-hexanodiil-di (2-naftill) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di (2-naftill) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 97%.

Além disso, o rendimento referido aqui indica o rendimento de N,N'-hexanodiil-di (2-naftill) éster de ácido carbâmico) formado na etapa (B). Ou seja, isto se refere ao valor obtido por dividir a quantidade obtida por subtração da quantidade de N,N'-hexanodiil-di (2-naftill) éster de ácido carbâmico) contido na mistura recuperada no tanque de armazenamento 603 usada nesta etapa a partir da quantidade de N,N'-hexanodiil-di ((2-naftil) éster de ácido carbâmico) contida no líquido de reação por uma quantidade de hexametilenodiamina usada na etapa (A).

[Exemplo 85]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 5 foi realizado com a exceção de usar 11,7 kg de 1-hexanol em vez de 1-octanol, usando 1,64 kg de uréia e 1,22 kg de 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina, e aquecer o tanque de armazenamento 103 a 120°C. Como um resultado de analisar o líquido de reação por cromatografia líquida, o líquido de reação foi verificado conter cerca de 7,8% em peso de 3-(ureídometil)- 3,5,5-trimetilciclohexiluréia. Além disso, a concentração de amônia na solução foi de 7500 ppm. 12,2 kg de um composto hidróxi aromático na forma de 4-fenil fenol foram adicionados a

partir do tanque de armazenamento 101 para obter uma solução homogênea. Linha 13 foi aberta e a solução foi transferida para o tanque de armazenamento 104 via a linha 13.

Etapas (R) e (D): Produção de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O mesmo método como nas etapas (R) e (D) de exemplo 4 foi realizado com a exceção de aquecer a coluna recheada 105 a 240°C, configurar a pressão dentro da coluna recheada 105 a cerca de 10 kPa. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter (1-hexil) éster de ácido 3-((1-hexilóxi) carbonilaminometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico), e o rendimento com base em 3-aminometil-3,5,5- triciclohexilamina foi cerca de 92%. A concentração de amônia no líquido de reação foi cerca de 10 ppm.

Etapa (P): Reação de transesterificação

O mesmo método como na etapa (P) de exemplo 4 foi realizado com a exceção de aquecer a coluna recheada 502 a 250°C e configurar a pressão interna para 15 kPa. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 505 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi encontrado para ser uma solução contendo (4-fenilfenil) éster de ácido 3-((4-(fenilfenilóxi) carbonilaminometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico), e o rendimento com base em 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foi de 88%.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

O aparelho de destilação de película fina 602 foi aquecido a 230°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a

cerca de 1,0 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 505 na etapa (P) acima foi colocado no tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1080 g/h via a linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado no tanque de armazenamento 603 (o componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 não foi alimentado no aparelho de destilação de película fina 602). Um componente gasoso contendo diisocianato de isoforona e p-dodecil fenol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O componente gasoso foi introduzido na coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado na coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. O componente de fase gasosa foi condensado no condensador 610 via a linha 69 e recuperado no tanque de armazenamento 612 através do separador de gás líquido 611.

Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de isoforona.

Etapa (R-2): Re-uso de mistura contendo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído não reagido

Quando a mistura recuperada no tanque de armazenamento 603 na etapa (F) acima foi analisada por cromatografia líquida, a mistura foi encontrada para ser uma mistura contendo (4-fenilfenil) éster de ácido 3-((4-fenilfenilóxi) carbonilaminometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico) e 4-fenil fenol, e o teor de (4-fenilfenil) éster de ácido 3-((4-fenilfenilóxi) carbonilaminometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico) foi cerca de 42% em

peso.

O mesmo método como nas etapas (R) e (D) acima foi realizado com a exceção de adicionar cerca de 1,5 kg da mistura recuperada no tanque de armazenamento 603 para o líquido de reação obtido por realizar o mesmo método como na etapa (A) acima para obter uma mistura, e usar esta mistura. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter (1-hexil) éster de ácido 3-((1-hexilóxi) carbonilamidometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico). O rendimento do (1-hexil) éster de ácido 3-((1-hexilóxi) carbonilamidometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico) formado nesta etapa (R-2) com base em 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foi cerca de 92%. A concentração de amônia no líquido de reação foi cerca de 10 ppm.

[Exemplo 86]

Etapa (P-2): Re-uso de mistura contendo O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído não reagido

O mesmo método como nas etapas (A) e (R) de exemplo 85 foram realizados para obter cerca de 20,3 kg de uma solução contendo (1-hexil) éster de ácido 3-((1-hexilóxi) carbonilamidometil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico). Cerca de 2,5 kg da mistura recuperada no tanque de armazenamento 603 de etapa (F) acima foram misturados com esta solução seguido por realizar o mesmo método como na etapa (P) acima para obter uma solução contendo (4-fenilfenil) éster de ácido 3-((4-fenilfenóxi) carbonilamidometil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico) no tanque de armazenamento 505. O rendimento do (4-fenilfenil) éster de ácido 3-((4-fenilfenilóxi) carbonilaminometil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico), excluindo o (4-fenilfenil) éster de ácido 3-((4-fenilfenilóxi) carbonilamidometil)-3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico) produzido na etapa

(P-2) e contido na mistura recuperada no tanque de armazenamento 603 que foi adicionado como descrito acima, com base em 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foi de 88%.

[Exemplo 87]

Etapa (A-2): Re-uso de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído não sofrendo a decomposição térmica

O mesmo método como nas etapas (A) e (R) de exemplo 85 foi realizado para obter cerca de 21,5 kg de uma solução contendo (1-hexil) éster de ácido 3-((1-hexilóxi) carbonilamidometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico).

O mesmo método como na etapa (A) acima foi realizado com a exceção de usar uma mistura de cerca de 6,8 kg desta solução e 16,9 kg de 1-octanol em vez de 1-octanol apenas, e usando 1,41 kg de hexametilenodiamina e 2,39 kg de uréia. Uma solução de reação foi obtida que continha 7,6% em peso de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia e 5300 ppm de amônia.

[Exemplo 88]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho mostrado na FIG. 13 foi usado.

30,5 kg de p-heptil fenol e 2,54 kg de uréia foram misturados no tanque de armazenamento 101 aquecido a 120°C com a linha 13 fechadas para obter uma mistura. A mistura foi transferida ao tanque de agitação 103 (com anteparos) aquecido a 120°C. A linha 19 foi conectada a uma bomba de vácuo e a pressão interna do tanque de agitação 103 foi reduzida a cerca de 70 kPa. 1,23 kg de amina orgânica na forma de hexametilenodiamina foram alimentados na taxa de cerca de 20 g/min (taxa de alimentação da amina orgânica) a partir do tanque de armazenamento 102 no tanque de agitação 103 via a linha 12 enquanto agitando o tanque de agitação 103. Após completar a alimentação de hexametilenodiamina, a agitação foi continuada durante cerca de 2 horas e o

líquido de reação foi amostrado. Como um resultado de analisar o líquido de reação por cromatografia líquida, 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia foi verificada como tendo sido formada em um rendimento de cerca de 97% com base no hexametilenodiamina. Além disso, a concentração de amônia na solução foi de 1200 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados.

Linha 13 foi então aberta e o líquido de reação foi transferido para o tanque de armazenamento 104 via a linha 13.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O aparelho mostrado na FIG. 13 ainda foi usado.

Uma coluna 105 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a 240°C e a pressão interna da coluna foi configurada a 26kPa. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado de uma linha 14 provido na coluna recheada 105 na taxa de cerca de 1,5 g/min. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentado após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 35,1 kg. O líquido de reação foi recuperado em um tanque de armazenamento 110 através de uma linha 16 provida no fundo da coluna recheada 105. Um componente de fase gasosa foi condensado de uma linha 15 provido no topo da coluna recheada 105 com um condensador 106 mantido a uma temperatura de cerca de 85°C, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado em um tanque de armazenamento 109 via um separador de gás líquido 108. Quando o líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 109 foi analisado por ^{1}H-RMN, o componente condensado foi verificado conter uréia e p-heptil fenol. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi de 23,0 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster

de ácido carbâmico). O rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametileno diamina foi cerca de 96%. Uréia não foi detectada no líquido de reação.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

Um aparelho de destilação de película fina 602 tendo uma área de superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 220°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,3 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 na etapa (B) foi colocado em um tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1800 g/h via uma linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado em um tanque de armazenamento 603. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 602 através de uma linha 63. Um componente gasoso contendo diisocianato de hexametileno e p-heptil fenol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O componente gasoso foi introduzido em uma coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. O componente de fase gasosa foi condensado em um condensador 610 via uma linha 69 e recuperado em um tanque de armazenamento 612 através de um separador de gás líquido 611.

Quando o condensado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia

gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base na amina orgânica (hexametileno diamina) foi cerca de 92%.

[Exemplo 89]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 88 foi realizado com a exceção de usar 29,5 kg de p-heptil fenol e 2,46 kg de uréia, reduzir a pressão no tanque de agitação 103 a cerca de 40 kPa, e usando 1,19 kg de hexametilenodiamina. Quando o líquido de reação foi analisado, 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia foi verificada como tendo sido formada em um rendimento de cerca de 91% com base no hexametilenodiamina. Além disso, N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) foi verificado como tendo sido formado em um rendimento de cerca de 0,5% com base no hexametilenodiamina. A concentração de amônia foi de 820 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados.

Linha 13 foi então aberta e o líquido de reação foi transferido para o tanque de armazenamento 104 via a linha 13.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O mesmo método como na etapa (B) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (A) acima. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 91%. Uréia não foi detectada no líquido de reação.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O mesmo método como na etapa (F) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (B) acima. Quando o condensado recuperado no tanque de armazenamento 612 foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base no hexametilenodiamina foi cerca de 86%.

[Exemplo 90]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 88 foi realizado com a exceção de usar 30,3 kg de p-heptil fenol e 2,52 kg de uréia, reduzir a pressão no tanque de agitação 103 a cerca de 26 kPa, e usando 1,22 kg de hexametilenodiamina. Quando o líquido de reação foi analisado, 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia foi verificada como tendo sido formada em um rendimento de cerca de 89% com base no hexametilenodiamina. Além disso, N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) foi verificado como tendo sido formado em um rendimento de cerca de 0,7% com base no hexametilenodiamina. A concentração de amônia foi de 350 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O mesmo método como na etapa (B) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (A) acima. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 90%. Uréia não foi detectada no líquido de reação.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de

O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O mesmo método como na etapa (F) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (B) acima. Quando o condensado recuperado no tanque de armazenamento 612 foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base no hexametilenodiamina foi cerca de 85%.

[Exemplo 91]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 88 foi realizado com a exceção de usar 31,8 kg de p-heptil fenol e 2,64 kg de uréia, reduzir a pressão no tanque de agitação 103 a cerca de 20 kPa, e usando 1,28 kg de hexametilenodiamina. Quando o líquido de reação foi analisado, 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia foi verificada como tendo sido formada em um rendimento de cerca de 82% com base no hexametilenodiamina. Além disso, N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) foi verificado como tendo sido formado em um rendimento de cerca de 5,2% com base no hexametilenodiamina. A concentração de amônia foi de 280 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O mesmo método como na etapa (B) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (A) acima. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 85%. Uréia não foi detectada no líquido de reação.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O mesmo método como na etapa (F) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (B) acima. Quando o condensado recuperado no tanque de armazenamento 612 foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base no hexametilenodiamina foi cerca de 82%.

[Exemplo 92]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 88 foi realizado com a exceção de usar 29,5 kg de p-heptil fenol e 2,46 kg de uréia, reduzir a pressão no tanque de agitação 103 a cerca de 20 kPa, e usando 1,19 kg de hexametilenodiamina. Quando o líquido de reação foi analisado, 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia foi verificada como tendo sido formada em um rendimento de cerca de 77% com base no hexametilenodiamina. Além disso, N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) foi verificado como tendo sido formado em um rendimento de cerca de 5,0% com base no hexametilenodiamina. A concentração de amônia foi de 120 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O mesmo método como na etapa (B) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (A) acima. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 82%. Uréia não foi detectada no líquido de

reação.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O mesmo método como na etapa (F) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (B) acima. Quando o condensado recuperado no tanque de armazenamento 612 foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base no hexametilenodiamina foi cerca de 79%.

[Exemplo 93]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 88 foi realizado com a exceção de usar 32,5 kg de p-heptil fenol e 2,71 kg de uréia, reduzir a pressão no tanque de agitação 103 a cerca de 20 kPa, e usando 1,31 kg de hexametilenodiamina. Quando o líquido de reação foi analisado, 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia foi verificada como tendo sido formada em um rendimento de cerca de 68% com base no hexametilenodiamina. Além disso, N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) foi verificado como tendo sido formado em um rendimento de cerca de 9,1% com base no hexametilenodiamina. A concentração de amônia foi de 90 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O mesmo método como na etapa (B) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (A) acima. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no

hexametilenodiamina foi cerca de 76%. Uréia não foi detectada no líquido de reação.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O mesmo método como na etapa (F) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (B) acima. Quando o condensado recuperado no tanque de armazenamento 612 foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base no hexametilenodiamina foi cerca de 71%.

[Exemplo 94]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 88 foi realizado com a exceção de usar 31,1 kg de p-heptil fenol e 2,58 kg de uréia, reduzir a pressão no tanque de agitação 103 a cerca de 20 kPa, e usando 1,25 kg de hexametilenodiamina. Quando o líquido de reação foi analisado, 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia foi verificada como tendo sido formada em um rendimento de cerca de 67% com base no hexametilenodiamina. Além disso, N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) foi verificado como tendo sido formado em um rendimento de cerca de 10,3% com base no hexametilenodiamina. A concentração de amônia foi de 17 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O mesmo método como na etapa (B) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (A) acima. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi verificado conter N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de

N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 74%. Uréia não foi detectada no líquido de reação.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O mesmo método como na etapa (F) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (B) acima. Quando o condensado recuperado no tanque de armazenamento 612 foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base no hexametilenodiamina foi cerca de 69%.

[Exemplo 95]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O mesmo método como na etapa (A) de exemplo 88 foi realizado com a exceção de usar 31,8 kg de p-heptil fenol e 2,65 kg de uréia, reduzir a pressão no tanque de agitação 103 a cerca de 20 kPa, e usando 1,28 kg de hexametilenodiamina. Quando o líquido de reação foi analisado, 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia foi verificada como tendo sido formada em um rendimento de cerca de 52% com base no hexametilenodiamina. Além disso, N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) foi verificado como tendo sido formado em um rendimento de cerca de 16,1% com base no hexametilenodiamina. A concentração de amônia foi de 8 ppm. Grupos amino terminais não reagidos não foram detectados.

Etapas (B) e (D): Produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O mesmo método como na etapa (B) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (A) acima. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi verificado conter

N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico), e o rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((p-heptilfenil) éster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi cerca de 65%. Uréia não foi detectada no líquido de reação.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído

O mesmo método como na etapa (F) de exemplo 74 foi realizado com a exceção de usar o líquido de reação de etapa (B) acima. Quando o condensado recuperado no tanque de armazenamento 612 foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 99% em peso de diisocianato de hexametileno. O rendimento com base no hexametilenodiamina foi cerca de 61%.

[Exemplo comparativo 1]

O aparelho mostrado na FIG. 13 foi usado.

1,21 kg de hexametilenodiamina, 2,51 kg de uréia e 42,9 kg de 4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenol foram misturados a 100°C para obter uma solução de matéria prima que foi colocada no tanque de armazenamento 104. A solução de matéria prima foi alimentada na taxa de cerca de 3,0 g/min na coluna de destilação 105 aquecida a 240°C e fixada a uma pressão interna de 30 kPa e permitiu reagir. Um componente de fase gasosa foi introduzido no condensador 106 via a linha 15 provida no topo da coluna de destilação 105 e o condensado foi recuperado no tanque de armazenamento 109. Por outro lado, um líquido de reação foi recuperado a partir da linha 16 provida no fundo da coluna e recuperado no tanque de armazenamento 110. Durante a reação, o líquido de reação foi amostrado a partir da linha de amostragem 18 provida entre a linha 14 e o fundo da coluna, e o líquido amostrado foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia líquida. O líquido amostrado foi encontrado para ser uma mistura contendo 0,12% em peso de hexametilenodiamina, 0,42% em peso

de 6-ureído-hexametilenoamina, 1,26% em peso de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia, 3,49% em peso de (4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenil éster de ácido N-(6-ureído-hexano-il) carbâmico), e 1,30% em peso de N,N'-hexanodiil-di ((4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenilléster de ácido carbâmico). A quantidade do líquido de reação recuperada no tanque de armazenamento 110 foi de 33,5 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por ^{1}H-RMN e cromatografia líquida, foi encontrado para ser um líquido de reação que continha N,N'-hexanodiil-di ((4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenilléster de ácido carbâmico). O rendimento de N,N'-hexanodiil-di ((4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenilléster de ácido carbâmico) com base no hexametilenodiamina foi de 53%. Além disso, o líquido de reação continha cerca de 13% em mols de N,N'-bis (6-(4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenoxicarbamino-hexil) uréia com base em N,N'-hexanodiil-di ((4-(1,1,3,3-tetrametilbutil) fenilléster de ácido carbâmico).

[Exemplo comparativo 2]

Etapa (A): Produção de composto tendo grupos ureído

O aparelho usado na FIG. 13 foi usado.

22,5 kg de 1-octanol e 2,27 kg de uréia foram misturados no tanque de armazenamento 101 aquecido a 120°C com a linha 13 fechada, e a mistura foi transferida ao tanque de agitação 103 aquecida a 120°C. 1,34 kg de amina orgânica na forma de 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foram então alimentados na taxa de cerca de 10 g/min a partir do tanque de armazenamento 102 no tanque de agitação 103 via a linha 12 enquanto agitando o tanque de agitação 103. Após completar a alimentação o 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina, a agitação foi continuada durante cerca de 2 horas e o líquido de reação foi amostrado. Como um resultado de analisar o líquido de reação por cromatografia líquida, o líquido de reação foi verificado conter cerca de 7,8% em peso de 3-(ureídometil)-3,5,5-trimetilciclohexiluréia. A concentração de amônia no

líquido de reação foi de 6800 ppm. Linha 13 foi aberta e a solução foi transferida para o tanque de armazenamento 104 via a linha 13.

Etapas (R) e (D): Produção de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído e recuperação de uréia

O aparelho mostrado na FIG. 13 ainda foi usado.

A coluna recheada 105 recheada com um material de recheio (Helipack No. 3) foi aquecida a190°C. O líquido de reação obtido na etapa (A) foi alimentado a partir da linha 14 provida na coluna recheada 105 na taxa de cerca de 1,1 g/min. Desde que a reação está inicialmente em um estado instável, a amostra neste momento foi descartada. A quantidade de líquido de reação alimentado após a reação ter alcançado um estado uniforme foi cerca de 23,4 kg. O líquido de reação foi recuperado no tanque de armazenamento 110 através da linha 16 provida no fundo da coluna recheada 105. Um componente de fase gasosa foi introduzido no condensador 106 a partir da linha 15 provido no topo da coluna recheada 105, e o componente de fase líquida resultante foi recuperado no tanque de armazenamento 109 via o separador de gás líquido 108. Quando o componente condensado recuperado no tanque de armazenamento 109 foi analisado por ^{1}H-RMN, o componente condensado foi verificado conter 1-octanol e uréia. A quantidade do líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 foi de 8,80 kg. Quando o líquido de reação foi analisado por cromatografia líquida e ^{1}H-RMN, o líquido de reação foi verificado conter (1-octil) éster de ácido 3-((1-octilóxi) carbonilamidometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico), e o rendimento com base em 3-aminometil-3,5,5-trimetilciclohexilamina foi cerca de 90%.

Etapa (F): Produção de isocianato por decomposição térmica de O-alquil éster de ácido carbâmico N-substituído

O aparelho mostrado na FIG. 17 foi usado.

Um aparelho de destilação de película fina 602 tendo uma área de

superfície condutora de calor de 0,2 m^2 foi aquecido a 220°C e a pressão dentro do aparelho de destilação de película fina foi configurada a cerca de 1,3 kPa. O líquido de reação recuperado no tanque de armazenamento 110 na etapa (B) foi colocado em um tanque de armazenamento 601 e alimentado no aparelho de destilação de película fina na taxa de cerca de 1800 g/h via uma linha 60. Um componente líquido foi extraído de uma linha 62 provida no fundo do aparelho de destilação de película fina 602 e recuperado em um tanque de armazenamento 603. O componente líquido recuperado no tanque de armazenamento 603 foi novamente alimentado no aparelho de destilação de película fina 602 através de uma linha 63. Um componente gasoso contendo diisocianato de hexametileno e p-heptil fenol foi extraído de uma linha 61 provida na porção superior do aparelho de destilação de película fina 602. O componente gasoso foi introduzido em uma coluna de destilação 604, e o componente de baixo ponto de ebulição foi separado por destilação. Um componente de fase líquida foi alimentado em uma coluna de destilação 609 de uma linha 68 provida em uma porção da coluna de destilação 604 menor do que a linha de alimentação e ainda submetido à separação destilativa. O componente gasoso foi condensado no condensador 610 via uma linha 69 e recuperado em um tanque de armazenamento 612 através de um separador de gás líquido 611.

Quando o condensado foi analisado por 1H-RMN e cromatografia gasosa, o condensado foi verificado conter cerca de 93% em peso de diisocianato de isoforona e cerca de 4% em peso de (1-octil) éster de ácido 3-((1-octilóxi) carbonilamidometil) -3,5,5-trimetilciclohexil carbâmico). O rendimento com base na amina orgânica (3-amino-metil-3,5,5-trimetilciclohexilamina) foi cerca de 53%.

[Exemplo 96]

Uma composição contendo 9% em peso de um composto tendo

grupos ureído na forma de 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia, 89% em peso de uma composição de hidróxi aromático na forma de 4-(2,4,4-trimetilpentan-2-il) fenol, 0,01% em peso de amônia e uréia em uma relação de 0,1 (referindo-se a uma relação de número de moléculas de uréia para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído, ou em outras palavras, 0,1 indica 0,2 de equivalentes molares porque o composto tendo grupos ureído tem dois grupos ureído em uma molécula do mesmo) foi colocada em um vaso de armazenamento a 100 L SUS a cerca de 1/2 o volume do mesmo, seguido por substituição do interior do vaso de armazenamento com nitrogênio, e armazenando durante 1095 dias em um ambiente de armazenamento encontrado no distrito de Kojima da cidade de Kurashiki na prefeitura de Okayama, Japão. A composição também continha outros componentes cuja estrutura não é evidente (como os compostos contendo grupos ureileno e os compostos contendo ligações de biureto terminais). Durante o período de armazenamento, o vaso foi aquecido com uma camisa de água quente circulante a 40°C (controlado em aproximadamente 30 a 50°C). Durante o período de armazenamento, a temperatura ocasionalmente caiu a cerca de 0°C ou se elevou a cerca de 50°C devido aos efeitos de falta de água, interrupções no fornecimento de energia e manutenção das instalações da fábrica. Além disso, a temperatura uma vez se elevou a cerca de 80°C devido a uma função irregular. Quando a composição foi analisada após armazenamento, o 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia foi contido a cerca de 92% em mols como comparado com antes ao armazenamento. Após o período de armazenamento, a composição foi aquecida a 180°C e introduzida através de um pré-aquecedor (dispositivo para pré-aquecer a composição a 230°C) na proximidade do meio da coluna de destilação de bandeja perfurada tendo um diâmetro interno de 6,35 cm e 40 placas teóricas (a operação da coluna de destilação foi realizada enquanto reduzindo a pressão a partir da pressão normal para reduzir a pressão

dentro de uma faixa de temperatura na fase líquida na porção inferior da coluna de destilação de 150 a 300°C e confirmando as condições de operação; a pressão mínima durante a operação foi cerca de 0,3 KPa). Um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia e a composição de hidróxi aromático na forma de carbamato de bis (4-(2,4,4-trimetilpentan-2-il) fenil) hexano-1,6-diila foi obtida a partir da porção inferior da coluna de destilação. Amônia formada como um subproduto na reação de esterificação, uma quantidade pequena de composição de hidróxi aromático, e um componente tendo um ponto de ebulição menor do que a composição de hidróxi aromático foram extraídos da porção superior da coluna de destilação (e incluído um subproduto na forma de um composto tendo um peso molecular de 178 ou menos e tendo um grupo carbonila, apesar da estrutura do mesmo ser incapaz de ser identificada). Apesar de o rendimento mudar do início até a conclusão da operação devido a flutuações em condições de operação, no maior nível de desempenho durante o período de operação, o rendimento do dicarbamato de bis-(4-(2,4,4-trimetilpentan-2-il) fenil) hexano-1,6-diil) com base em 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia no início do período de armazenamento foi de 87% em mols. Não ocorreu entupimento de linhas durante tanto armazenamento como transferência, e a formação de sólidos dentro da coluna de destilação não foi observada.

[Exemplos 97 a 144 e exemplos comparativos 3 a 6]

Armazenamento e esterificação (reação para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por reagir grupos ureído com um composto hidróxi aromático) foram realizados usando 1,1'-(hexano-1,6-diil) diuréia para o composto tendo grupos ureído sob as mesmas condições como no exemplo 96 com a exceção das relações de compósitos do composto tendo grupos ureído, composição de hidróxi aromático, amônia, derivado de ácido carbônico e outros, e os resultados da destilação são mostrados na tabelas 37 a 44. Os

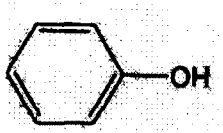
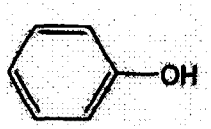
rendimentos de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído são indicados como valores obtidos por análise de um componente de fase líquida a partir da porção inferior da coluna de destilação da placa perfurada.

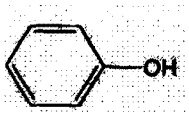
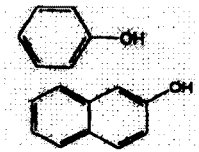
Nas tabelas, ArOH representa um composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático. O teor de cada componente na composição é representado como uma porcentagem em peso (% em peso) obtido arredondando os teores do composto tendo grupos ureído, composição de hidróxi aromático, água e amônia ao número de dígitos significantes do aparelho de análise ou menos, os componentes de metal são expressos em ppm, enquanto outros componentes (como derivado de ácido carbônico) são indicados como uma relação do número de moléculas dos mesmos para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído. (Salvo indicado ao contrário, fenômenos tais como entupimento ou formação de sólidos não ocorrem durante o armazenamento ou a transferência.)

Os espectros de

^{1}H-RMN das composições para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído de exemplos 97, 106, 122 e 142 são mostrados nas FIGS. 23, 24, 25 e 26, respectivamente.

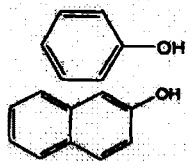
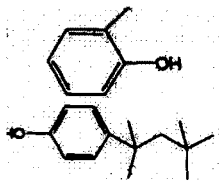
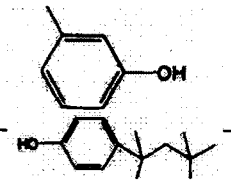
[Tabela 37]

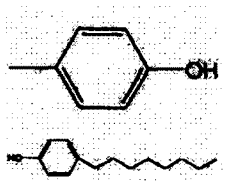
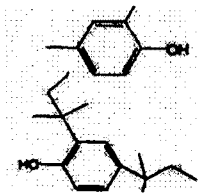
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armazenamento versus antes armazenamento (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 97	17,0		81	0,0001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	95,0	92,0
Exemplo 98	9,7		72	0,0001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, carbamato de	85,0	82,0

					difenilhexano-1,6-diila: 16,5% em peso		
Exemplo 99	1,0		99	0,0001		98,0	97,0
Exemplo 100	17,7		51,5 30	0,05	Íon de Fe: 20 ppm, Íon de Ni: 15 ppm	98,3	93,7
Exemplo comparativo 3	17,7		0	0,0001	1-butanol: 79% em peso, uréia: 0,01	3	(formação de sólidos , bomba entupiu)
Exemplo comparativo 4	17,7		0	0,001	1-butanol: 80% em peso. dilaurato de dibutil estanho: 2010 ppm	3	(formação de sólidos , bomba entupiu)
Exemplo comparativo 5	96		0	0,0001	1-butanol: 0,1% em peso, uréia: 0,001, compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,0	(agarramento durante aquecimento, bomba entupiu)

[Tabela 38]

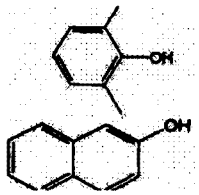
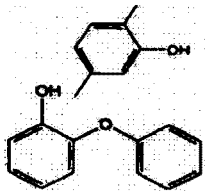
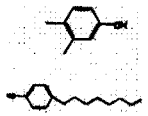
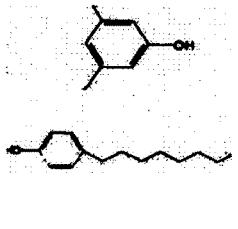
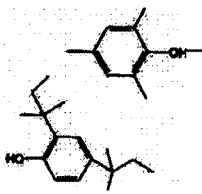
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armazenamento (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 101	97		0	0,001	1-butanol: 0,1% em peso, uréia: 0,001	98,0	(apesar de incapaz de ser transferido após armazenamento devido a ser um pó, capaz de ser transferido quando um tanque de agitação separado com agitador foi provido e uma solução de fenol 17,7% em peso fenol foi preparada a 120°C; rendimento neste momento: 70% mol)
Exemplo comparativo 6	98,5		0	0,001	1-butanol: 0,1% em peso, uréia: 0,001	97,5	(incapaz de ser transferido após armazenamento devido a ser um pó, grande quantidade de material

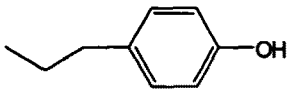
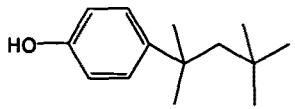
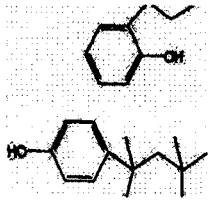
							insolúvel causou entupimento da bomba mesmo com um tanque de agitação separado com agitador e uma solução de 1-butanol a 17,7% em peso foi preparada a 110°C
Exemplo 102	17,7		51 30	0,01	Íon de Fe: 20 ppm, Íon de Ni: 15 ppm, dilaurato de dibutil estanho: 2010 ppm	18,1	17,3
Exemplo 103	15,8		10 72	0,01	Dilaurato de dibutil estanho: 10 ppm, éster de ácido carbônico total: 0,001	99,4	97,6
Exemplo 104	15,8		10 73,2	0,001	Água: 90 ppm	98,1	93,5
Exemplo 105	15,8		10	0,01	Íon de Fe: 20 ppm, Íon de Ni: 30 ppm	86,1	81,7

			73,2		dilaurato de dibutil estanho: 300 ppm		
Exemplo 106	14,2		14 70	0,005	Compostos totais contendo grupo biureto: 0,005, íon de Ai: 40 ppm	97,9	88,4

[Tabela 39]

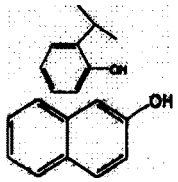
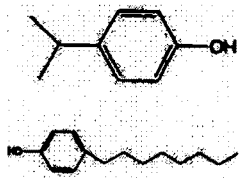
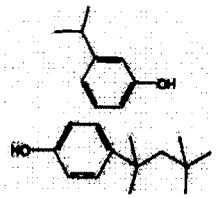
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armazen. o versus antes armazen. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 107	14,2		20	0,01	Uréia: 1, Íon de Al: 40 ppm	98,6	96,4

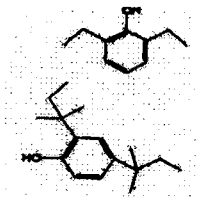
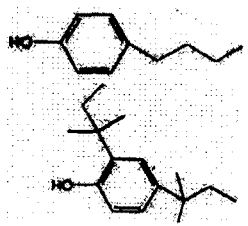
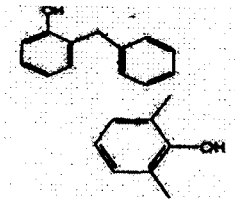
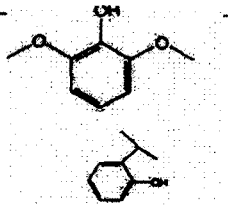
			56				
Exemplo 108	14,2		14 70	0,04	Uréia: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 590 ppm	76,1	68,6
Exemplo 109	14,2		45 39	0,1	Compostos c/ gupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 290 ppm	88,0	83,8
Exemplo 110	14,2		45 39	0,5	Compostos totais contendo grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm	97,0	92,7
Exemplo 111	12,9		25	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005,	97,0	88,9

			60		dilaurato de dibutil estanho: 30 ppm, água: 0,5% em peso		
Exemplo 112	12,9	 	10 75	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm, água: 0,5% em peso	97,0	92,7
Exemplo 113	20,0		20 59	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005	99,0	90,0

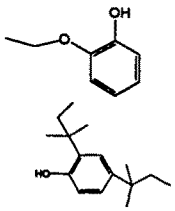
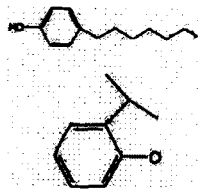
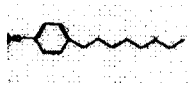
[Tabela 40]

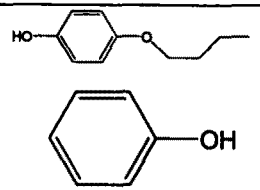
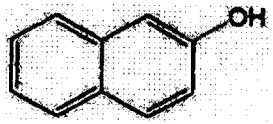
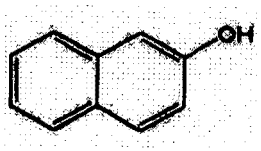
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto c/ grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos

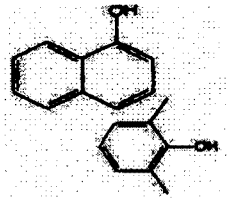
							ureído antes armazen.)
Exemplo 114	12,9		20 65	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005	98,4	96,4
Exemplo 115	12,9		25 60	0,2	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 40 ppm, água: 0,5% em peso	95,3	90,4
Exemplo 116	12,9		20 65	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,4	93,5
Exemplo 117	11,9		20	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total:	98,3	88,6

			65		0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005		
Exemplo 118	11,9		26 60	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos com grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm	97,5	87,8
Exemplo 119	9,9		70 18	0,2	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos com grupo biureto: 0,005	98,0	96,4
Exemplo 120	11,6		70 15	0,4	Compostos com grupo ureileno total: 0,015, com grupo biureto terminal: 0,015	97,4	87,9

[Tabela 41]

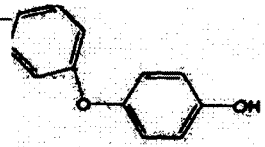
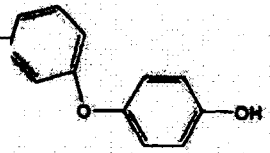
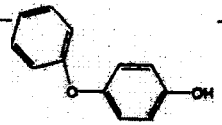
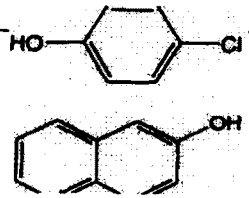
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 121	12,8		20 63	0,3	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,020, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,015	97,7	87,9
Exemplo 122	9,5		79,5 10	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	95,8	94,1
Exemplo 123	8,9		74	0,01	Naftaleno: 15% em peso, compostos contendo grupo	96,6	91,2

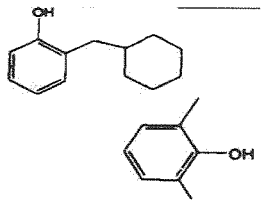
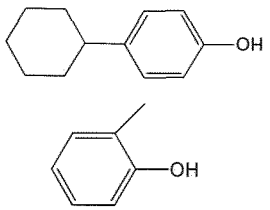
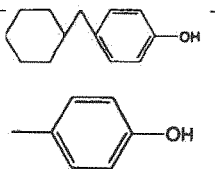
					ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005		
Exemplo 124	10,8		76 10	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	96,3	91,2
Exemplo 125	12,3		80	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, butanol: 5% em peso	95,9	94,1
Exemplo 126	12,3		85	0,01	Compostos com grupo ureileno total: 0,002, com grupo biureto terminal: 0,005	98,4	96,4

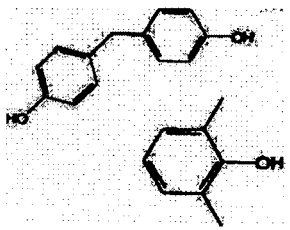
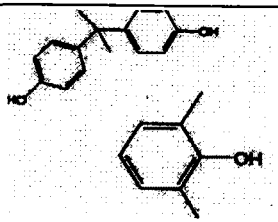
Exemplo 127	12,3		76 10	0,02	Compostos c/ grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,4	88,6

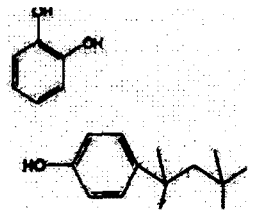
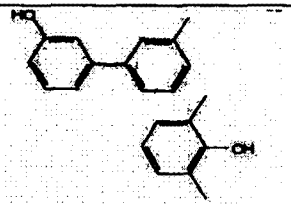
[Tabela 42]

[Tabela 43]

	composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)		composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	amônia na composição (% em peso)	mesmos em composição (%)	composto tendo grupos ureído após armazen. versus antes armaz. (% mol)	O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 128	5,2		93,8	0,02	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	99,0	98,0
Exemplo 129	14,5		84	0,02	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,0	95,0
Exemplo 130	21,4		77	0,02	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	95,8	60,0
Exemplo 131	13,6		20 63	0,02	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,022, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,015	83,8	42,0
Exemplo 132	12,8		72	0,05	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,022, compostos contendo	76,6	38,0

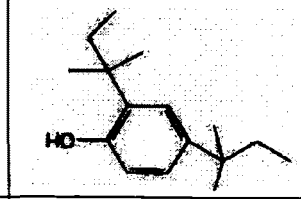
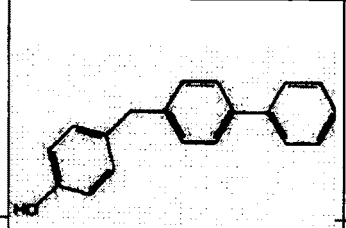
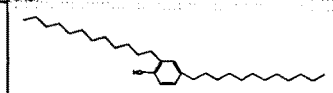
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% peso)	Teor de amônia composiç ão (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Rel. composto tendo grupos ureído após armazenamento versus antes armazenamento (% mol)	Rend. O-aril éster ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 135	17,5		60 20	0,3	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,3	88,2
Exemplo 136	20,0		55 24	0,02	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, ditolilcarbonato: 0,01	98,2	96,3
Exemplo 137	15,0		62	0,05	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002,	97,3	95,3

			10 10		compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, ditolilcarbonato: 0,01		
Exemplo 138	9,2		78 10	0,04	Uréia: 0,05, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,05, dixililcarbonato: 0,06, dilaurato de dibutil estanho: 650 ppm	73,9	66,6
Exemplo 139	8,1		77 10	0,01	Uréia: 0,05, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,05, dixililcarbonato: 0,06	98,8	59,0
Exemplo 140	15,5		10	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002,	98,7	73,0

			72		compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005		
Exemplo 141	9,9		68 20	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,0	96,4

[Tabela 44]

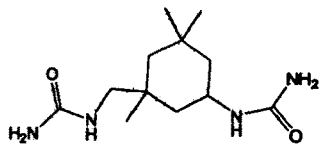
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% peso)	Teor de amônia composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Rel.composto c/ grupos ureído após armazen. versus antes armaz. (% mol)	Rend. O-aril éster ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)

Exemplo 142	7,9		90	0,2	Compostos com grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, uréia: 0,001	73,0	51,2
Exemplo 143	8,0		90	0,3	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos com grupo biureto terminal: 0,005, uréia: 0,001	98,8	49,2
Exemplo 144	4,5		90	0,5	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,02, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,05, uréia: 0,01	64,4	32,0

[Exemplo 145]

Uma composição contendo 21% em peso de um composto tendo grupos ureído representados pela seguinte fórmula (200), 77% em peso de uma composição de hidróxi aromático na forma de fenol, 0,01% em peso de amônia e uréia em uma relação de 0,01 (referindo-se a uma relação do número de moléculas de uréia para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído, ou em outras palavras, 0,01 indica 0,02 equivalentes molares porque o composto tendo grupos ureído tem dois grupos ureído em uma molécula do mesmo) foi colocada em um vaso de armazenamento a 100 L SUS a cerca de 1/2 o volume do mesmo, seguido por substituição do interior do vaso de armazenamento com nitrogênio, e armazenando durante 1095 dias em um ambiente de armazenamento encontrado no distrito de Kojima da Cidade de Kurashiki na prefeitura de Okayama, Japão. A composição também continha outros componentes cuja estrutura não é evidente (como os compostos contendo grupos ureileno e os compostos contendo ligações de biureto terminais). Durante o período de armazenamento, o vaso foi aquecido com uma camisa de água quente circulante a 40°C (controlado em aproximadamente 30 a 50°C). Durante o período de armazenamento, a temperatura ocasionalmente caiu a cerca de 0°C ou se elevou a cerca de 50°C devido aos efeitos de falta de água, interrupções no fornecimento de energia e manutenção das instalações da fábrica. Além disso, a temperatura uma vez se elevou a cerca de 80°C devido a uma função irregular. Quando a composição foi analisada após armazenamento, o composto tendo grupos ureído estava contido na composição a cerca de 93% em mols como comparado com antes ao armazenamento. Após o período de armazenamento, a composição foi aquecida a 180°C e introduzida através de um pré-aquecedor (dispositivo para pré-aquecer a composição a 230°C) na proximidade do meio da coluna de destilação de bandeja perfurada tendo um

diâmetro interno de 6,35 cm e 40 placas teóricas (operação da coluna de destilação foi realizada enquanto reduzindo a pressão a partir da pressão normal para reduzir a pressão dentro de uma faixa de temperatura na fase líquida na porção inferior da coluna de destilação de 150 a 300°C e confirmando as condições de operação; a pressão mínima durante a operação foi cerca de 0,3 KPa). Um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático foi obtida a partir da porção inferior da coluna de destilação. Amônia formada como um subproduto na reação de esterificação, uma quantidade pequena de composição de hidróxi aromático, e um componente tendo um ponto de ebulição menor do que a composição de hidróxi aromático foram extraídos da porção superior da coluna de destilação (e incluído um subproduto na forma de um composto tendo um peso molecular de 178 ou menos e tendo um grupo carbonila, apesar da estrutura do mesmo ser incapaz de ser identificada). Apesar de o rendimento mudar do início até a conclusão da operação devido a flutuações em condições de operação, no maior nível de desempenho durante o período da operação, o rendimento do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído com base no composto tendo grupos ureído no início do período de armazenamento foi de 87% em mols. Não ocorreu entupimento de linhas durante tanto armazenamento como transferência, e a formação de sólidos dentro da coluna de destilação não foi observada.



(200)

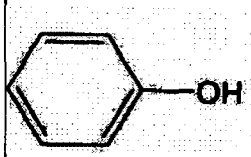
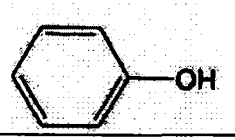
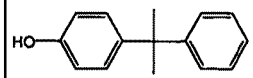
[Exemplos 146 a 186 e exemplos comparativos 7 a 10]

Armazenamento e esterificação (reação para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por reagir grupos ureído com um composto hidróxi aromático) foram realizados usando o composto tendo grupos ureído

representados pela fórmula (200) no exemplo 145 sob as mesmas condições como no exemplo 145 com a exceção das relações de compósitos do composto tendo grupos ureído, composição de hidróxi aromático, amônia, derivado de ácido carbônico e outros, e os resultados da destilação são mostrados na tabelas 45 a 50. Os rendimentos de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído são indicados como valores obtidos por análise de um componente de fase líquida a partir da porção inferior da coluna de destilação da placa perfurada.

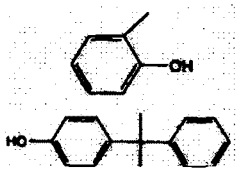
Nas tabelas, ArOH representa um composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático. O teor de cada componente na composição é representado como uma porcentagem em peso (% em peso) obtido arredondando os teores do composto tendo grupos ureído, composição de hidróxi aromático, água e amônia ao número de dígitos significantes do aparelho de análise ou menos, os componentes de metal são expressos em ppm, enquanto outros componentes (como derivado de ácido carbônico) são indicados como a relação do número de moléculas dos mesmos para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído. (Salvo indicado ao contrário, fenômenos como entupimento ou a formação de sólidos não ocorrem durante o armazenamento ou transferência.)

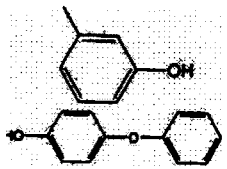
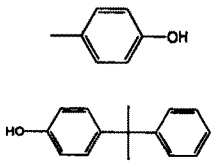
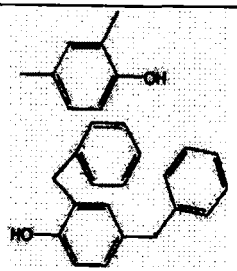
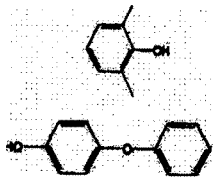
Tabela 45]

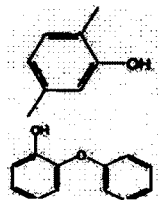
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 146	12,0		68	0,0001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, carbamato de difenilhexano-1,6-diil a: 16,5% em peso	95,0	92,0
Exemplo 147	1,0		99	0,0001		98,0	91,0
Exemplo 148	21,4		48 30	0,05	Íon de Fe: 20 ppm, Íon de Ni: 15 ppm	98,6	93,7
Exemplo	20,0		0	0,0001	1-butanol: 79% em	3	(formação de sólidos , bomba

comparativo 7					peso, uréia: 0,001		entupiu)
Exemplo comparativo 8	20,0		0	0,001	1-butanol: 79% em p, dilaurato de dibutil estanho: 2010 ppm	4	(formação de sólidos , bomba entupiu)
Exemplo comparativo 9	96		0	0,01	1-butanol: 0,1% em p uréia: 0,001, compostos com grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	99,0	(agarramento durante aquecimento, bomba entupiu)
Exemplo 149	98		0	0,0001	1-butanol: 0,1% em peso, uréia: 0,001	99,0	(apesar de incapaz de ser transferido após armaz. devido a ser um pó, capaz de ser transferido com tanque de agitação separado com agitador e a 17,7% em peso solução de fenol preparada a 120°C; rendimento neste momento: 70% mol)

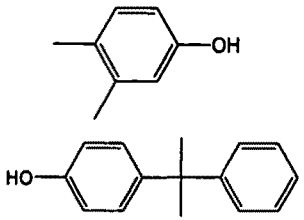
[Tabela 46]

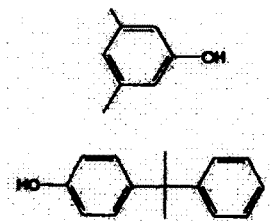
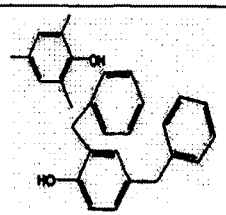
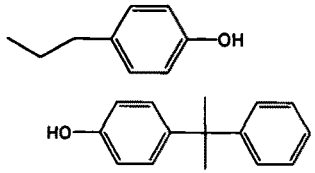
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo comparativo 10	98		0	0,0001	1-butanol: 0,1% em peso, uréia: 0,001	98,0	(incapaz de ser transferido após armazenamento devido a ser um pó, grande quantidade de material insolúvel causou entupimento da bomba mesmo com um tanque de agitação separado com agitador e uma solução de 1-butanol a 17,7% em peso foi preparada a 110°C
Exemplo 150	19,2		9 70	0,01	Dilaurato de dibutil estanho: 10 ppm, éster de ácido carbônico total: 0,001	89,0	85,0

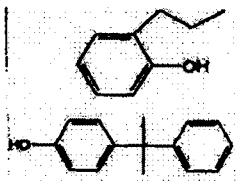
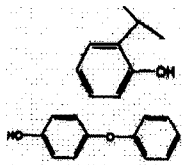
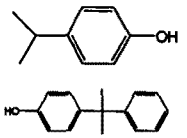
Exemplo 151	19,2		9 70	0,001	Água: 90 ppm	98,4	98,4
Exemplo 152	55,0		40 4,5	0,01	Íon de Fe: 20 ppm, Íon de Ni: 30 ppm, dilaurato de dibutil estanho: 300 ppm	80,0	25,0
Exemplo 153	17,3		14 67	0,005	Compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, íon de Al: 40 ppm	98,3	88,4
Exemplo 154	17,3		20 61	0,01	Uréia: 0,001, Íon de Al: 40 ppm	98,8	96,4

Exemplo 155	17,3		14 67	0,04	Uréia: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 590 ppm	76,3	68,6

[Tabela 47]

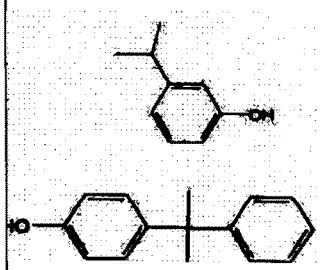
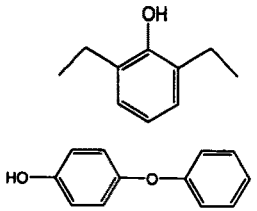
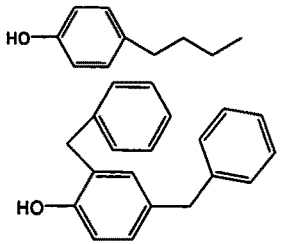
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% em p.)	Teor de amônia composição (% em p.)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Rel. composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 156	17,3		21 60	0,1	Compostos com grupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 290 ppm	88,4	83,8

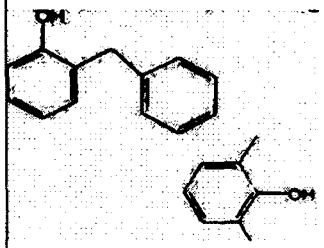
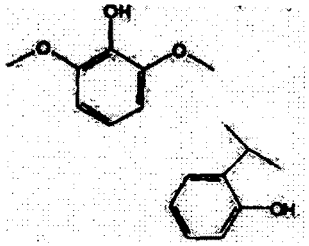
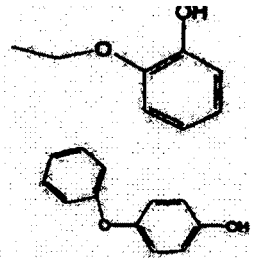
Exemplo 157	45,0		44 10	0,5	Compostos com grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm	97,7	34,0
Exemplo 158	15,8		22 60	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 30 ppm, água: 0,5% peso	99,4	88,9
Exemplo 159	15,8		23 60	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos c/ grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm, água: 0,5% peso	98,1	92,7

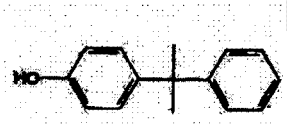
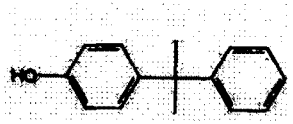
Exemplo 160	5,0		34 60	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005	98,0	97,0
Exemplo 161	1,5		38 60	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005	98,0	96,4
Exemplo 162	15,8		22 60	0,2	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 40 ppm, água: 0,5% peso	95,6	90,4

[Tabela 48]

	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% peso)	Teor de amônia composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto c/ grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (%	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)

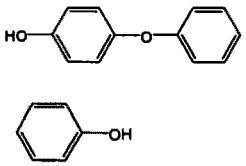
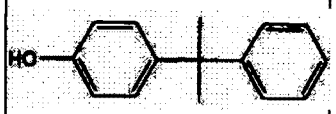
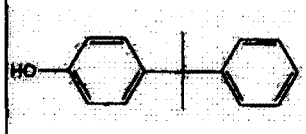
						mol)	
Exemplo 163	15,8		23 60	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,7	93,5
Exemplo 164	3,0		36 60	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	97,9	88,6
Exemplo 165	14,6		23 60	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005,	97,3	87,8

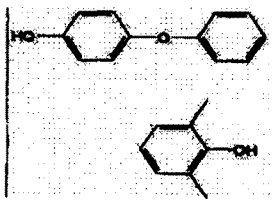
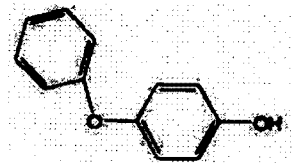
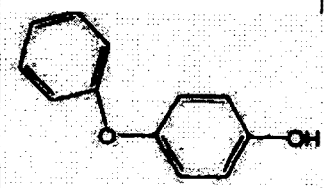
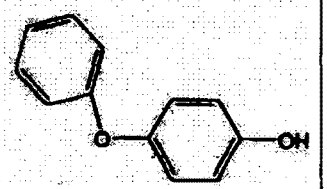
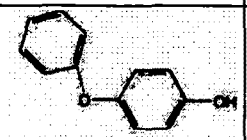
					dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm		
Exemplo 166	12,2		60 16,5	0,2	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,4	96,4
Exemplo 167	14,3		70 13,5	0,4	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,015, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,015	97,2	87,9
Exemplo 168	5,0		24,5 70	0,3	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,020, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,015	97,5	87,9

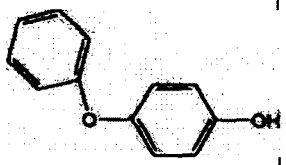
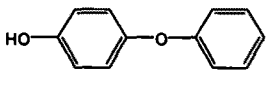
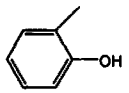
Exemplo 169	11,8		70	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	95,8	94,1
Exemplo 170	11,1		72	0,01	Naftaleno: 15% em peso, compostos com grupo ureileno total: 0,002, compostos com grupo biureto terminal: 0,005	95,5	94,1

[Tabela 49]

	Teor de composto tendo grupos ureído na	ArOH	Teor de composto hidróxi aromátic	Teor de amônia na composiçã o (% em	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após	Rendimento O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol)

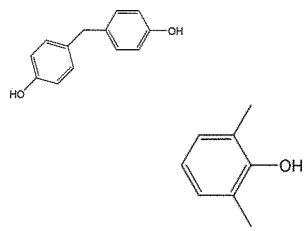
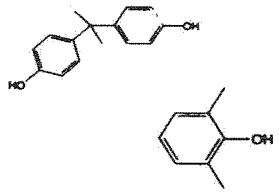
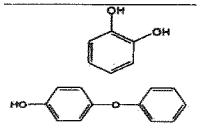
	composição (% em peso)		o na composição (% em peso)	peso)		armazenamento versus antes armaz. (% mol)	(rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 171	13,4		75 10	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	93,3	91,7
Exemplo 172	15,1		78	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, butanol: 5% em peso	96,0	94,1
Exemplo 173	15,1		83	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,7	96,4
Exemplo 174	15,1		73,5	0,02	Compostos contendo grupo	99,3	97,2

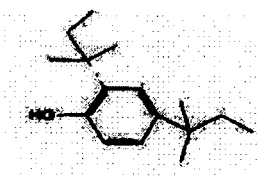
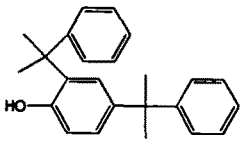
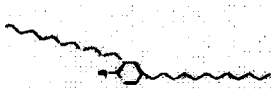
			10		ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005		
Exemplo 175	6,4		92	0,02	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	96,9	94,1
Exemplo 176	18,0		81	0,02	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	95,9	94,1
Exemplo 177	25,6		73	0,02	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	96,1	38,0
Exemplo 178	40,8		57	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002,	95,8	25,0

					compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005		
Exemplo 179	25,0		74	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	95,9	85,0
Exemplo 180	18,3	 	70 9	0,05	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, ditolilcarbonato: 0,01	97,3	95,3

[Tabela 50]

	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% em	Teor de amônia composição (% peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armazen. versus antes armazen. (% mol)	Rend. O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)

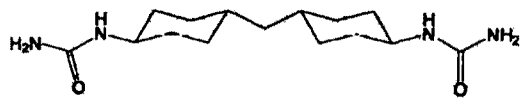
			peso)				
Exemplo 181	11,3		75 9	0,04	Uréia: 0,005, compostos c/ grupo biureto terminal: 0,05, dixilil carbonato: 0,06, dilaurato de dibutil estanho: 650 ppm	74,3	66,6
Exemplo 182	10,1		76 10	0,01	Uréia: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,05, carbonato dixilila: 0,06	98,0	59,0
Exemplo 183	18,9		10 70	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos com grupo biureto	98,4	73,8

					terminal: 0,005		
Exemplo 184	9,9		89	0,2	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, uréia: 0,001	63,6	44,8
Exemplo 185	10,1		88	0,3	Compostos c/ grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, uréia: 0,001	98,0	39,4
Exemplo 186	5,6		92	0,5	Compostos c/ grupo ureileno total: 0,02, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,05, uréia: 0,01	64,3	32,0

[Exemplo 187]

Uma composição contendo 17,1% em peso de um composto tendo grupos ureído representados pela seguinte fórmula (201), 82% em peso de uma composição de hidróxi aromático na forma de 4-(2-fenilpropano-2-il) fenol, 0,01% em peso de amônia e uréia em uma relação de 0,001 (referindo-se a uma relação do número de moléculas de uréia para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído, ou em outras palavras, 0,001 indica 0,002 equivalentes molares porque o composto tendo grupos ureído tem dois grupos ureído em uma molécula do mesmo) foi colocada em um vaso de armazenamento a 100 L SUS a cerca de 1/2 o volume do mesmo, seguido por substituição do interior do vaso de armazenamento com nitrogênio, e armazenando durante 1095 dias em um ambiente de armazenamento encontrado no distrito de Kojima da Cidade de Kurashiki na prefeitura de Okayama, Japão. A composição também continha outros componentes cuja estrutura não é evidente (como os compostos contendo grupos ureileno e os compostos contendo ligações de biureto terminais). Durante o período de armazenamento, o vaso foi aquecido com uma camisa de água quente circulante a 40°C (controlado em aproximadamente 30 a 50°C). Durante o período de armazenamento, a temperatura ocasionalmente caiu a cerca de 0°C ou se elevou a cerca de 50°C devido aos efeitos de falta de água, interrupções no fornecimento de energia e manutenção das instalações da fábrica. Além disso, a temperatura uma vez se elevou a cerca de 80°C devido a uma função irregular. Quando a composição foi analisada após armazenamento, o composto tendo grupos ureído estava contido na composição a cerca de 98% em mols como comparado com antes ao armazenamento. Após o período de armazenamento, a composição foi aquecida a 180°C e introduzida através de um pré-aquecedor (dispositivo para pré-aquecer a composição a 230°C) na proximidade do meio da coluna de destilação de bandeja perfurada tendo um

diâmetro interno de 6,35 cm e 40 placas teóricas (operação da coluna de destilação foi realizada enquanto reduzindo a pressão a partir da pressão normal para reduzir a pressão dentro de uma faixa de temperatura na fase líquida na porção inferior da coluna de destilação de 150 a 300°C e confirmando as condições de operação; a pressão mínima durante a operação foi cerca de 0,3 KPa). Um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático foi obtida a partir da porção inferior da coluna de destilação. Amônia formada como um subproduto na reação de esterificação, uma quantidade pequena de composição de hidróxi aromático, e um componente tendo um ponto de ebulição menor do que a composição de hidróxi aromático foram extraídos da porção superior da coluna de destilação (e incluído um subproduto na forma de um composto tendo um peso molecular de 178 ou menos e tendo um grupo carbonila, apesar da estrutura do mesmo ser incapaz de ser identificada). Apesar de o rendimento mudar do início até a conclusão da operação devido a flutuações em condições de operação, no maior nível de desempenho durante o período da operação, o rendimento do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído com base no composto tendo grupos ureído no início do período de armazenamento foi de 96,4% em mols. Não ocorreu entupimento de linhas durante tanto armazenamento como transferência, e a formação de sólidos dentro da coluna de destilação não foi observada.



(201)

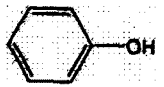
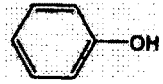
[Exemplos 187-1 a 226 e exemplos comparativos 11 a 14]

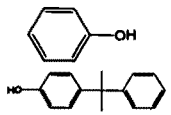
Armazenamento e esterificação (reação para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por reagir grupos ureído com um composto hidróxi aromático) foram realizados usando o composto tendo grupos ureído representados pela fórmula (201) no exemplo 187 sob as mesmas condições

como no exemplo 187 com a exceção das relações de compósitos do composto tendo grupos ureído, composição de hidróxi aromático, amônia, derivado de ácido carbônico e outros, e os resultados da destilação são mostrados na tabelas 51 a 56. Os rendimentos de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído são indicados como valores obtidos por análise de um componente de fase líquida a partir da porção inferior da coluna de destilação da placa perfurada.

Nas tabelas, ArOH representa um composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático. O teor de cada componente na composição é representado como uma porcentagem em peso (% em peso) obtido arredondando os teores do composto tendo grupos ureído, composição de hidróxi aromático, água e amônia ao número de dígitos significantes do aparelho de análise ou menos, os componentes de metal são expressos em ppm, enquanto outros componentes (como derivado de ácido carbônico) são indicados como a relação do número de moléculas dos mesmos para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído. (Salvo indicado ao contrário, fenômenos como entupimento ou a formação de sólidos não ocorrem durante o armazenamento ou transferência.)

[Tabela 51]

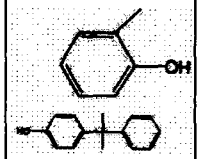
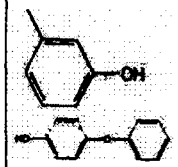
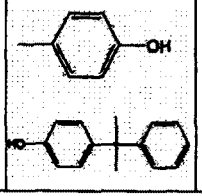
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Teor de composto tendo grupos ureído na composição após armaz. (% peso)	Relação composto c/ grupos ureído após armaz. X antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto c/ grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 187-1	24,0		74	0,001	Uréia: 0,01	22,2	95,0	92,0
Exemplo 188	13,0		85	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto	12,6	93,0	91,0

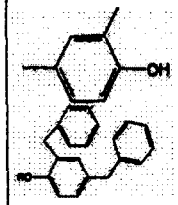
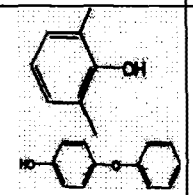
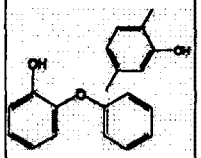
					terminal: 0,005, carbamato de fenila: 0,01			
Exemplo 189	24,0		25 50	0,05	Íon de Fe: 20 ppm Íon de Ni: 15 ppm	23,6	98,3	93,7
Exemplo comparativo 11	29,6		0	0,0001	1-butanol: 58% em peso, uréia: 1	4,8	3	(formação sólidos , bomba entupiu)
Exemplo comparativo 12	20,0		0	0,001	1-butanol: 79% em peso, dilaurato de dibutil estanho: 2010 ppm	0,9	4	(formação sólidos , bomba entupiu)
Exemplo comparativo 13	66		0	0,0001	1-butanol: 0,1% em peso, uréia: 0,5, compostos contendo grupo ureileno total:	96,5	91,0	(formação de sólidos , bomba entupiu)

					0,005, compostos c/ grupo biureto terminal:0,005			
Exemplo 190	67		0	0,001	1-butanol: 0,1% em peso, uréia: 1	97,5	95,0	(apesar de incapaz de ser transferido após armaz. devido a ser um pó, capaz de ser transferido com um tanque de agitação separado com agitador e uma solução de fenol de 17,7% em peso foi preparada a 120°C; rendimento neste momento: 89% mol)

[Tabela 52]

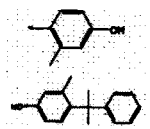
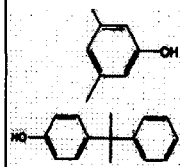
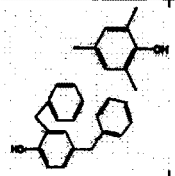
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Teor de composto tendo grupos ureído na composição após armazenamento (% em peso)	Relação do composto c/ grupos ureído após armaz. X antes armaz. (% mol)	Rendimento de -O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo	67		0	0,0001	1-butanol: 0,1% em	96,5	95,0	(incapaz de ser transferido após

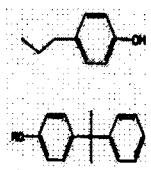
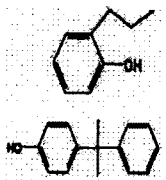
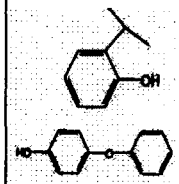
comparativo 14					peso, uréia 1			armazenamento devido a ser um pó, grande quantidade de material insolúvel causou entupimento da bomba mesmo com um tanque de agitação separado com agitador e uma solução de 1-butanol de 17,7% em peso foi preparada a 110°C)
Exemplo 191	21,5		8 68	0,01	Dilaurato de dibutil estanho: 10 ppm, éster de ácido carbônico total: 0,001	21,4	99,5	97,6
Exemplo 192	21,5		17 60	0,001	Água: 90 ppm	21,2	98,6	96,4
Exemplo 193	21,5		27 50	0,01	Íon de Fe: 20 ppm, Íon de Ni: 30 ppm, dilaurato de dibutil	18,5	86,0	84,3

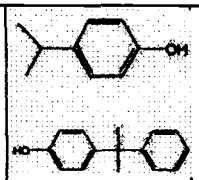
					estanho: 300 ppm			
Exemplo 194	19,5		18 60	0,005	Compostos com grupo biureto total: 0,005, íon de Al: 40 ppm	19,2	98,5	88,4
Exemplo 195	19,5		29 50	0,01	Uréia: 0,001, íon de Al: 40 ppm	19,2	98,5	96,4
Exemplo 196	19,5		19 60	0,04	Uréia: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 590 ppm	14,9	76,4	68,6

[Tabela 53]

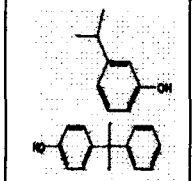
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático	Teor de amônia na composição (% em	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Teor composto tendo grupos	Relação composto c/grupos ureído	Rendimento de -O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus

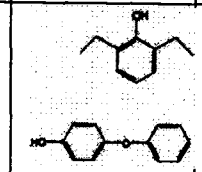
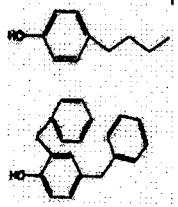
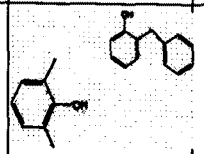
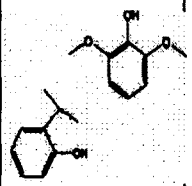
	(% em peso)		na composição (% em peso)	peso)		ureído na composição após armazenamento (% em peso)	após armaz. versus antes armaz. (% mol)	composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 197	19,5		19 60	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 290 ppm	17,2	88,2	83,8
Exemplo 198	19,5		19 60	0,5	Compostos totais contendo grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm	19,1	97,9	92,7
Exemplo 199	17,9		21 60	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil	17,7	98,9	88,9

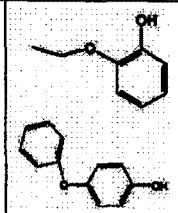
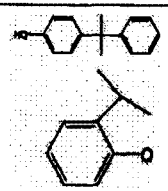
					estanho: 30 ppm, água: 0,5% em peso			
Exemplo 200	17,9		20 60	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm, água: 0,5% em peso	17,4	97,2	92,7
Exemplo 201	17,9		21 60	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005	17,9	99,0	98,0
Exemplo 202	17,9		20 60	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005	17,6	98,3	96,4

Exemplo 203	17,9		20 60	0,2	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 40 ppm, água: 0,5% peso	17,0	95,0	90,4

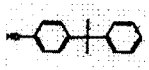
[Tabela 54]

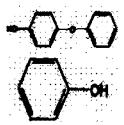
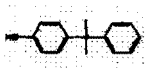
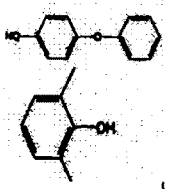
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Teor composto tendo grupos ureído na compos. após armaz.(% p)	Relação composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de -O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 204	17,9		20 60	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo	17,6	98,3	93,5

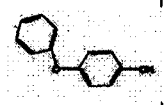
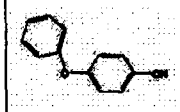
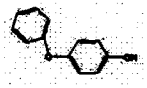
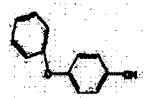
					biureto terminal: 0,005			
Exemplo 205	16,5		21 60	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	16,2	98,2	88,6
Exemplo 206	16,5		21 60	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm	16,1	97,6	87,8
Exemplo 207	13,9		68 16	0,2	Uréia: 0,001	13,6	97,8	96,4
Exemplo 208	16,1		60 11	0,4	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,015, compostos contendo grupo	15,7	97,5	90,0

					biureto terminal: 0,015			
Exemplo 209	17,7		11,5 68	0,3	Uréia: 0,001	17,2	97,2	87,9
Exemplo 210	13,4		70 15,5	0,1	Uréia: 0,001	12,8	95,5	94,1

[Tabela 55]

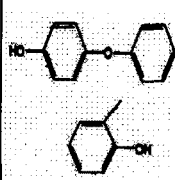
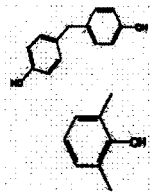
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Teor de composto tendo grupos ureído na composição após armaz. (%p)	Relação composto c/ grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de -O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 211	12,6		71	0,01	Xileno: 15% em peso, compostos contendo grupo	12,1	96,0	94,1

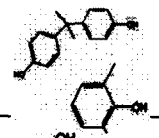
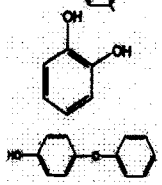
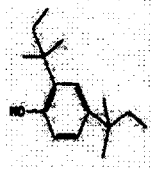
					ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005			
Exemplo 212	15,1		73,5 10	0,01	Uréia: 0,01	14,2	94,0	91,7
Exemplo 213	17,1		76	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, butanol: 5% em peso	16,4	95,9	94,1
Exemplo 214	17,1		71 10	0,02	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	16,9	98,8	97,2

Exemplo 215	7,4		91	0,02	Uréia: 0,001	7,1	99,0	98,0
Exemplo 216	27,0		72	0,02	Uréia: 0,001	13,2	96,4	94,1
Exemplo 217	28,5		70	0,02	Uréia: 0,001	27,3	95,8	75,0
Exemplo 218	44,3		54	0,001	Uréia: 0,001	42,5	95,9	25,0

[Tabela 56]

	Teor de composto tendo grupos ureído na composição	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático	Teor de amônia na composição (% em	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Teor de composto tendo grupos ureído na composição após	Relação composto tendo grupos	Rendimento de -O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (%

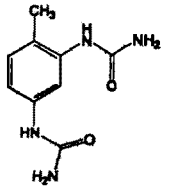
	(% em peso)		na composição (% em peso)	peso)		armazenamento (% em peso)	ureído após armaz. versus antes (%	mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 219	34,7		64	0,001	Uréia: 0,001	33,3	96,0	38,0
Exemplo 220	20,6		66 10	0,05	Compostos c/ grupo ureileno total: 0,002, compostos c/ grupo biureto terminal: 0,005, carbonato de ditolila: 0,01	20,0	97,1	95,3
Exemplo 221	12,9		73 10	0,04	Uréia: 0,001, compostos c/ grupo biureto: 0,05, carbonato de dixilila: 0,06, dilaurato de dibutil estanho: 650 ppm	9,5	73,6	66,6
Exemplo 222	11,5		75	0,01	Uréia: 0,005, compostos c/	11,3	98,3	59,0

			10		grupo biureto: 0,05, carbonato de dixilila: 0,06			
Exemplo 223	21,2		10 68	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	20,9	98,6	73,8
Exemplo 224	11,2		85	0,2	Compostos c/ grupo ureileno total: 0,002, compostos c/ grupo biureto terminal: 0,005, uréia: 0,1	7,2	64,3	44,8
Exemplo 225	11,5		86	0,3	Compostos c/ grupo ureileno total: 0,002, compostos c/ grupo biureto terminal: 0,005, uréia: 0,001	11,3	98,3	39,4
Exemplo 226	6,4		92	0,5	Compostos c/ grupo ureileno total: 0,02, compostos c/ grupo biureto terminal: 0,05, uréia: 0,001	4,1	64,1	32,0

[Exemplo 227]

Uma composição contendo 12,6% em peso de um composto tendo grupos ureído representados pela seguinte fórmula (202), 86% em peso de uma composição de hidróxi aromático na forma de 4-(2-fenilpropano-2-il) fenol, 0,01% em peso de amônia e uréia em uma relação de 0,001 (referindo-se a uma relação do número de moléculas de uréia para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído, ou em outras palavras, 0,001 indica 0,002 equivalentes molares porque o composto tendo grupos ureído tem dois grupos ureído em uma molécula do mesmo) foi colocada em um vaso de armazenamento a 100 L SUS a cerca de 1/2 o volume do mesmo, seguido por substituição do interior do vaso de armazenamento com nitrogênio, e armazenando durante 1095 dias em um ambiente de armazenamento encontrado no distrito de Kojima da Cidade de Kurashiki na prefeitura de Okayama, Japão. A composição também continha outros componentes cuja estrutura não é evidente (como os compostos contendo grupos ureileno e os compostos contendo ligações de biureto terminais). Durante o período de armazenamento, o vaso foi aquecido com uma camisa de água quente circulante a 40°C (controlado em aproximadamente 30 a 50°C). Durante o período de armazenamento, a temperatura ocasionalmente caiu a cerca de 0°C ou se elevou a cerca de 50°C devido aos efeitos de falta de água, interrupções no fornecimento de energia e manutenção das instalações da fábrica. Além disso, a temperatura uma vez se elevou a cerca de 80°C devido a uma função irregular. Quando a composição foi analisada após armazenamento, o composto tendo grupos ureído estava contido na composição a 98,4% em mols como comparado com antes ao armazenamento. Após o período de armazenamento, a composição foi aquecida a 180°C e introduzida através de um pré-aquecedor (dispositivo para pré-aquecer a composição a 230°C) na proximidade do meio da coluna de destilação de bandeja perfurada tendo um

diâmetro interno de 6,35 cm e 40 placas teóricas (operação da coluna de destilação foi realizada enquanto reduzindo a pressão a partir da pressão normal para reduzir a pressão dentro de uma faixa de temperatura na fase líquida na porção inferior da coluna de destilação de 150 a 300°C e confirmando as condições de operação; a pressão mínima durante a operação foi cerca de 0,3 KPa). Um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático foi obtida a partir da porção inferior da coluna de destilação. Amônia formada como um subproduto na reação de esterificação, uma quantidade pequena de composição de hidróxi aromático, e um componente tendo um ponto de ebulição menor do que a composição de hidróxi aromático foram extraídos da porção superior da coluna de destilação (e incluído um subproduto na forma de um composto tendo um peso molecular de 178 ou menos e tendo um grupo carbonila, apesar da estrutura do mesmo ser incapaz de ser identificada). Apesar de o rendimento mudar do início até a conclusão da operação devido a flutuações em condições de operação, no maior nível de desempenho durante o período da operação, o rendimento do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído com base no composto tendo grupos ureído no início do período de armazenamento foi de 96,4% em mols. Não ocorreu entupimento de linhas durante tanto armazenamento como transferência, e a formação de sólidos dentro da coluna de destilação não foi observada.



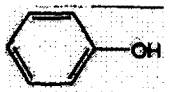
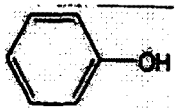
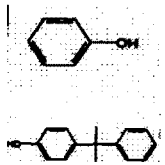
(202)

[Exemplos 228 a 266 e exemplos comparativos 15 a 17]

Armazenamento e esterificação (reação para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por reagir grupos ureído com um composto hidróxi aromático) foram realizados usando o composto tendo grupos ureído representados pela fórmula (202) no exemplo 227 sob as mesmas condições como no exemplo 227 com a exceção das relações de compósitos do composto tendo grupos ureído, composição de hidróxi aromático, amônia, derivado de ácido carbônico e outros, e os resultados da destilação são mostrados na tabelas 57 a 62. Os rendimentos de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído são indicados como valores obtidos por análise de um componente de fase líquida a partir da porção inferior da coluna de destilação da placa perfurada.

Nas tabelas, ArOH representa um composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático. O teor de cada componente na composição é representado como uma porcentagem em peso (% em peso) obtido arredondando os teores do composto tendo grupos ureído, composição de hidróxi aromático, água e amônia ao número de dígitos significantes do aparelho de análise ou menos, os componentes de metal são expressos em ppm, enquanto outros componentes (como derivado de ácido carbônico) são indicados como a relação do número de moléculas dos mesmos para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído. (Salvo indicado ao contrário, fenômenos como entupimento ou a formação de sólidos não ocorrem durante o armazenamento ou transferência.)

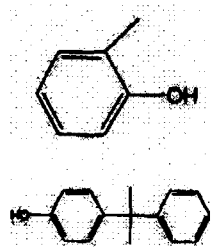
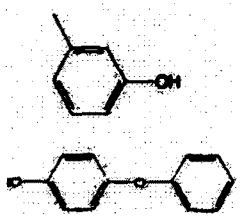
[Tabela 57]

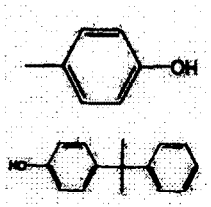
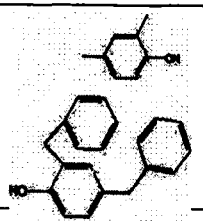
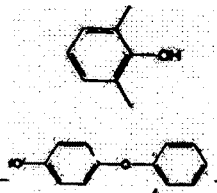
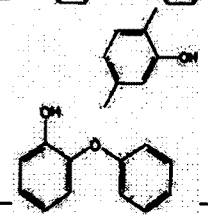
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 227	18,1		79	0,001	Uréia: 0,1	95,0	92,0
Exemplo 228	10,0		78	0,001	Compostos c/ grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, dicarbamato de difenil-4-metil-1,3-fenileno: 10% em peso	92,4	87,8
Exemplo 229	18,1		31 50	0,05	Íon de Fe: 20 ppm, Íon de Ni: 15 ppm	98,6	93,7

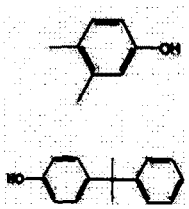
Exemplo comparativo 15	20,0		0	0,0001	1-butanol: 68% em peso, uréia: 1	3	(formação de sólidos , bomba entupiu)
Exemplo comparativo 16	32,0		0	0,001	1-butanol: 67% em peso, dilaurato de dibutil estanho: 2010 ppm	4	(formação de sólidos , bomba entupiu)
Exemplo 230	63		0	0,0001	1-butanol: 0,1% em peso, uréia: 1,0	93,0	(apesar de incapaz de ser transferido após armazenamento devido a ser um pó, capaz de ser transferido mesmo com tanque de agitação separado com agitador e uma solução de fenol de 17,7% em peso foi preparada a 120°C; rendimento agora: 93% mol)
Exemplo comparativo 17	63		0	0,0001	1-butanol: 0,1% em peso, uréia: 1,0	93,0	(incapaz de ser transferido após armazenamento devido a ser um pó, grande quantidade de material insolúvel causou entupimento da bomba mesmo com um tanque de agitação separado com

							agitador e uma solução de 1-butanol de 17,7% em peso foi preparada a 110°C

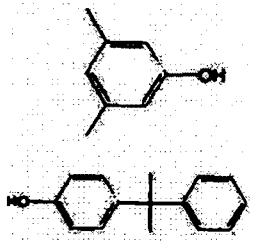
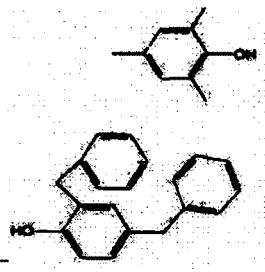
[Tabela 58]

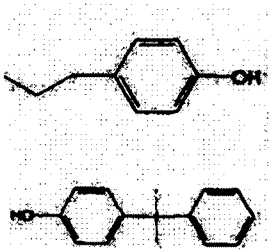
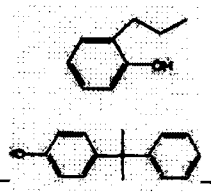
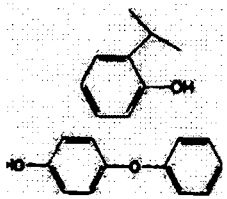
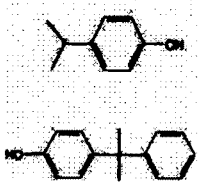
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor composto hidróxi aromático na comp. (% p)	Teor de amônia na comp (% peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 231	16,1		8 75	0,01	Dilaurato de dibutil estanho: 10 ppm, éster de ácido carbâmico total: 0,001	99,6	97,6
Exemplo 232	16,1		18 65	0,001	Água: 90 ppm	98,4	96,4

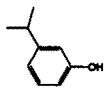
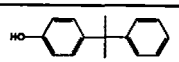
Exemplo 233	16,1		28 55	0,01	Íon de Fe: 20 ppm, Íon de Ni: 30 ppm, dilaurato de dibutil estanho: 300 ppm	86,0	84,3
Exemplo 234	14,6		20 64	0,005	Compostos contendo grupo biureto: 0,005, íon de Al: 40 ppm	98,2	88,4
Exemplo 235	14,6		30 54	0,01	Uréia: 0,001, Íon de Al: 40 ppm	98,4	96,4
Exemplo 236	14,6		20 64	0,04	Uréia: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 590 ppm	76,2	68,6

Exemplo 237	14,6		20 63	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 290 ppm	88,2	83,8

[Tabela 59]

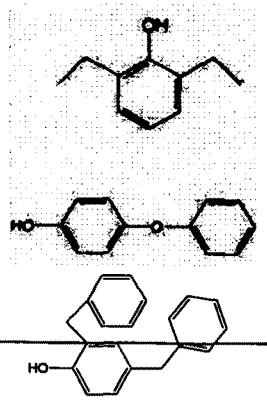
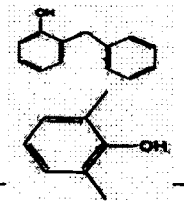
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% peso)	Teor amônia na composição (% peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 238	1,0		20 79	0,5		98,0	95,0
Exemplo 239	2,0		20 78	0,01		98,8	94,0

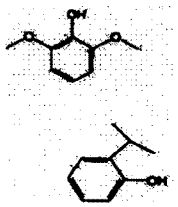
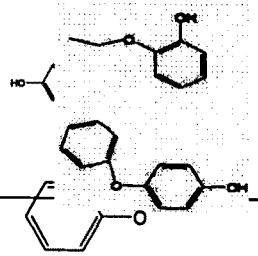
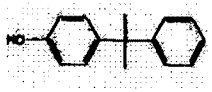
Exemplo 240	13,3		21,5 60	0,01	Compostos com grupo ureileno total: 0,005, compostos com grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm, água: 0,5% em peso	97,6	92,7
Exemplo 241	2,0		20 78	0,01		99,0	99,0
Exemplo 242	13,3		21 64	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005	98,4	96,4
Exemplo 243	13,3		21 64	0,2	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, dilaurato	95,2	90,4

					de dibutil estanho: 40 ppm, água: 0,5% em peso		
Exemplo 244	13,3		21 64	0,001	Compostos com grupo ureileno total: 0,005, compostos com grupo biureto terminal: 0,005	98,4	93,5

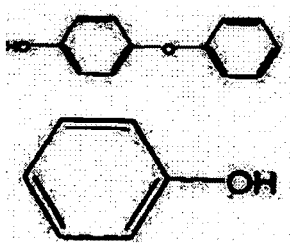
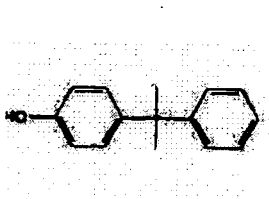
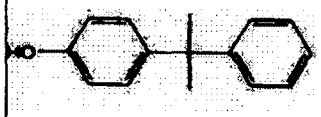
[Tabela 60]

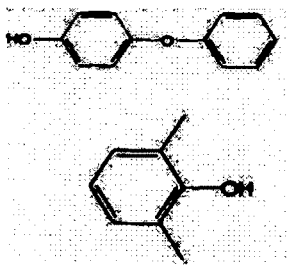
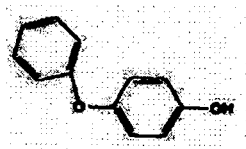
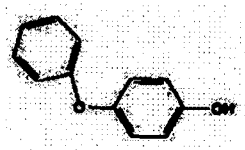
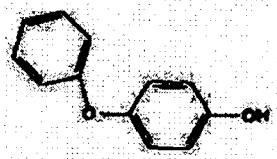
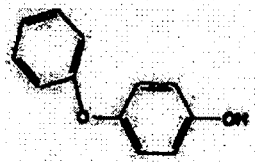
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 245	1,0		50 48,5	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total:	98,4	97,0

					0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005		
Exemplo 246	12,2		22 63	0,001	Compostos com grupo ureileno total: 0,005, compostos com grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm	97,6	87,8
Exemplo 247	10,2		72 16	0,2	Uréia: 0,01	98,4	96,4
Exemplo 248	11,9		73 13	0,4	Compostos contendo grupo ureileno total:	97,6	87,9

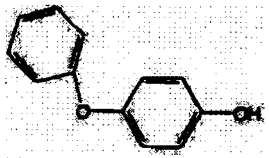
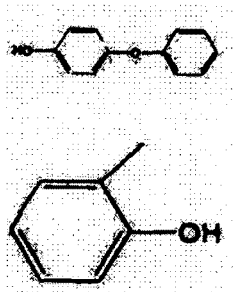
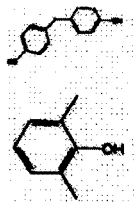
					0,015, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,015		
Exemplo 249	13,1		13 70	0,3	Uréia: 0,01	97,6	93,0
Exemplo 250	9,8		70 17	0,1	Uréia: 0,01	99,0	99,0
Exemplo 251	9,2		74	0,01	Xileno: 15% em peso, compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	96,0	94,1

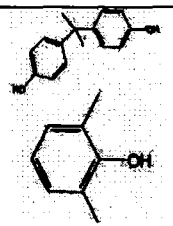
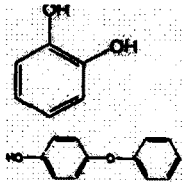
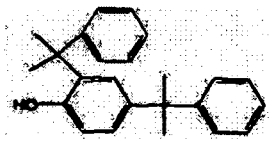
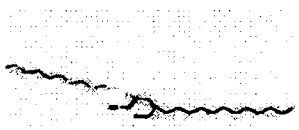
[Tabela 61]

	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 252	11,1		72 15	0,01	Uréia: 0,01	93,6	91,7
Exemplo 253	12,6		81	0,01	Compostos com grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, butanol: 5% em peso	96,0	94,1
Exemplo 254	12,6		86	0,01	Uréia: 0,001	98,4	96,4

Exemplo 255	12,6		71,5 14	0,02	Compostos com grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	99,2	97,2
Exemplo 256	5,3		93	0,02	Uréia: 0,05	99,0	98,0
Exemplo 257	19,5		80	0,02	Uréia: 0,05	96,0	94,1
Exemplo 258	21,8		76	0,02	Uréia: 0,05	96,0	75,0
Exemplo 259	35,9		62	0,001	Uréia: 0,05	96,0	25,0

[Tabela 62]

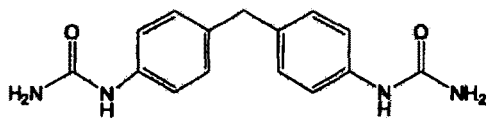
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 260	27,2		70	0,001	Uréia: 0,05	96,0	38,0
Exemplo 261	15,4		68 13	0,05	Compostos com grupo ureileno total: 0,002, compostos com grupo biureto terminal: 0,005, carbonato de ditolila: 0,01	97,2	95,3
Exemplo 262	9,4		76 10	0,04	Uréia: 0,05, compostos com grupo biureto terminal: 0,05, carbonato de dixilila:	74,0	66,6

					dilaurato dibutil estanho 650 pm		
Exemplo 263	8,4		77 10	0,01	Uréia: 0,05, compostos com grupo biureto terminal: 0,05, carbonato de dixilila: 0,06	98,4	59,0
Exemplo 264	15,9		12 70	0,01	Compostos com grupo ureileno total: 0,002, compostos com grupo biureto terminal: 0,005	98,4	73,8
Exemplo 265	8,4		90	0,3	Compostos com grupo ureileno total: 0,002, compostos com grupo biureto terminal: 0,005, uréia: 0,001	98,4	39,4
Exemplo 266	4,6		93	0,5	Compostos com grupo ureileno total: 0,02, compostos com biureto terminal: 0,05, uréia: 0,01	64,0	32,0

[Exemplo 267]

Uma composição contendo 16,5% em peso de um composto tendo grupos ureído representados pela seguinte fórmula (203), 81% em peso de uma composição de hidróxi aromático na forma de 4-(2-fenilpropano-2-il) fenol, 0,01% em peso de amônia e uréia em uma relação de 0,001 (referindo-se a uma relação do número de moléculas de uréia para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído, ou em outras palavras, 0,001 indica 0,002 equivalentes molares porque o composto tendo grupos ureído tem dois grupos ureído em uma molécula do mesmo) foi colocada em um vaso de armazenamento a 100 L SUS a cerca de 1/2 o volume do mesmo, seguido por substituição do interior do vaso de armazenamento com nitrogênio, e armazenando durante 1095 dias em um ambiente de armazenamento encontrado no distrito de Kojima da Cidade de Kurashiki na prefeitura de Okayama, Japão. A composição também continha outros componentes cuja estrutura não é evidente (como os compostos contendo grupos ureileno e os compostos contendo ligações de biureto terminais). Durante o período de armazenamento, o vaso foi aquecido com uma camisa de água quente circulante a 40°C (controlado em aproximadamente 30 a 50°C). Durante o período de armazenamento, a temperatura ocasionalmente caiu a cerca de 0°C ou se elevou a cerca de 50°C devido aos efeitos de falta de água, interrupções no fornecimento de energia e manutenção das instalações da fábrica. Além disso, a temperatura uma vez se elevou a cerca de 80°C devido a uma função irregular. Quando a composição foi analisada após armazenamento, o composto tendo grupos ureído estava contido na composição a 98,4% em mols como comparado com antes ao armazenamento. Após o período de armazenamento, a composição foi aquecida a 180°C e introduzida através de um pré-aquecedor (dispositivo para pré-aquecer a composição a 230°C) na proximidade do meio da coluna de destilação de bandeja perfurada tendo um

diâmetro interno de 6,35 cm e 40 placas teóricas (operação da coluna de destilação foi realizada enquanto reduzindo a pressão a partir da pressão normal para reduzir a pressão dentro de uma faixa de temperatura na fase líquida na porção inferior da coluna de destilação de 150 a 300°C e confirmando as condições de operação; a pressão mínima durante a operação foi cerca de 0,3 KPa). Um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático foi obtida a partir da porção inferior da coluna de destilação. Amônia formada como um subproduto na reação de esterificação, uma quantidade pequena de composição de hidróxi aromático, e um componente tendo um ponto de ebulição menor do que a composição de hidróxi aromático foram extraídos da porção superior da coluna de destilação (e incluído um subproduto na forma de um composto tendo um peso molecular de 178 ou menos e tendo um grupo carbonila, apesar da estrutura do mesmo ser incapaz de ser identificada). Apesar de o rendimento mudar do início até a conclusão da operação devido a flutuações em condições de operação, no maior nível de desempenho durante o período da operação, o rendimento do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído com base no composto tendo grupos ureído no início do período de armazenamento foi de 96,4% em mols. Não ocorreu entupimento de linhas durante tanto armazenamento como transferência, e a formação de sólidos dentro da coluna de destilação não foi observada.



(203)

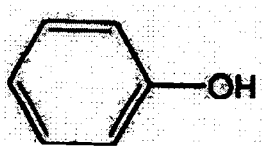
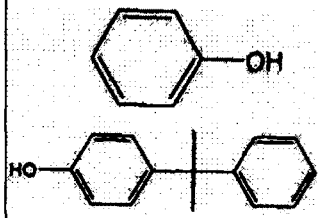
[Exemplos 268 a 304 e exemplo comparativo 18]

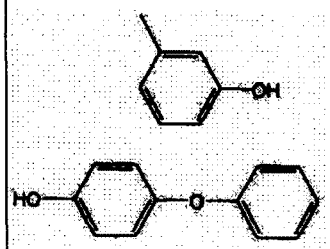
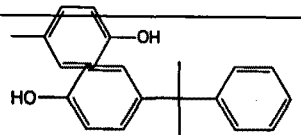
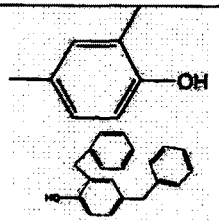
Armazenamento e esterificação (reação para obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído por reagir grupos ureído com um composto hidróxi aromático) foram realizados usando o composto tendo grupos ureído

representados pela fórmula (203) no exemplo 267 sob as mesmas condições como no exemplo 267 com a exceção das relações de compósitos do composto tendo grupos ureído, composição de hidróxi aromático, amônia, derivado de ácido carbônico e outros, e os resultados da destilação são mostrados na tabelas 63 a 67. Os rendimentos de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído são indicados como valores obtidos por análise de um componente de fase líquida a partir da porção inferior da coluna de destilação da placa perfurada.

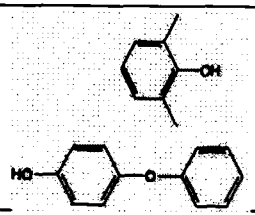
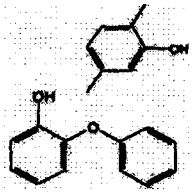
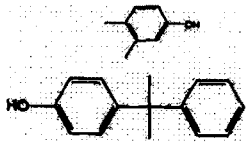
Nas tabelas, ArOH representa um composto hidróxi aromático que compõe uma composição de hidróxi aromático. O teor de cada componente na composição é representado como uma porcentagem em peso (% em peso) obtido arredondando os teores do composto tendo grupos ureído, composição de hidróxi aromático, água e amônia ao número de dígitos significantes do aparelho de análise ou menos, os componentes de metal são expressos em ppm, enquanto outros componentes (como derivado de ácido carbônico) são indicados como a relação do número de moléculas dos mesmos para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído. (Salvo indicado ao contrário, fenômenos como entupimento ou a formação de sólidos não ocorrem durante o armazenamento ou transferência.)

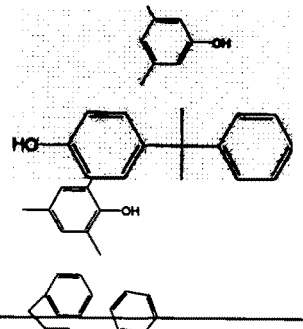
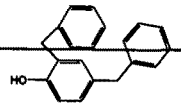
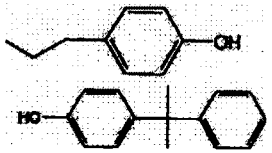
[Tabela 63]

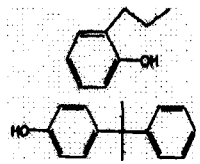
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 268	23,2		75	0,001	Uréia: 0,1	95,0	92,0
Exemplo 269	23,2		30 45	0,05	Íon de Fe: 20 ppm, Íon de Ni: 15 ppm	98,6	93,7
Exemplo comparativo 18	20,0		0	0,0001	1-butanol: 79% em peso	3	(formação de sólidos , bomba entupiu)
Exemplo 270	98		0	0,001	1-butanol: 0,1% em peso	95,0	(apesar de incapaz de ser transferido após armazenamento devido a ser um pó, capaz de ser transferido com um tanque de

							agitação separado com agitador e solução de fenol a 10% em peso foi preparada a 120°C; rendimento neste momento: 93% mol)
Exemplo 271	20,8		15 62	0,001	Água: 90 ppm	98,4	96,4
Exemplo 272	20,8		22 55	0,01	Íon de Fe: 20 ppm, íon de Ni: 30 ppm, dilaurato de dibutil estanho: 300 ppm	86,0	84,3
Exemplo 273	18,9		19 60	0,005	Compostos com grupo biureto: 0,005, íon de Al: 40 ppm	98,2	88,4

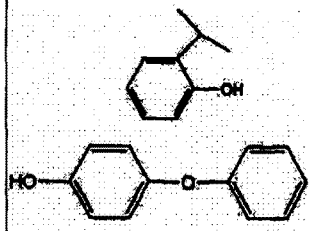
[Tabela 64]

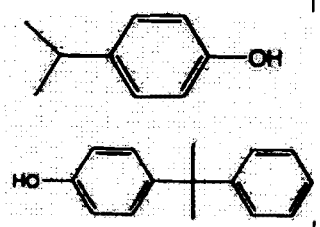
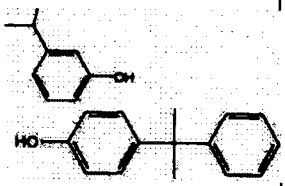
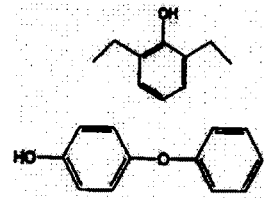
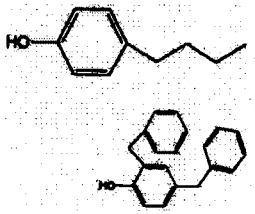
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 274	18,9		25 54	0,01	Uréia: 0,001, Íon de Al: 40 ppm	98,4	96,4
Exemplo 275	18,9		18 60	0,04	Uréia: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 590 ppm	76,2	68,6
Exemplo 276	18,9		18 60	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 290 ppm	88,2	83,8

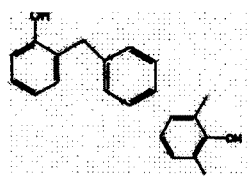
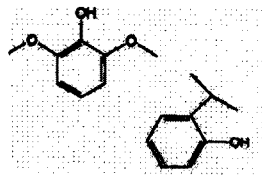
Exemplo 277	18,9		18 61	0,5	Compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm	97,6	92,7
Exemplo 278	17,3		20 60	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 30 ppm, água: 0,5% em peso	98,8	88,9
Exemplo 279	17,3		21 60	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos com grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm, água: 0,5% em peso	97,6	92,7

Exemplo 280	3,0		20 76,5	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005	99,0	98,0

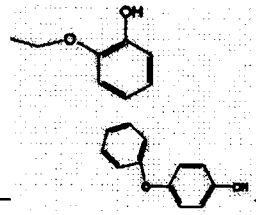
[Tabela 65]

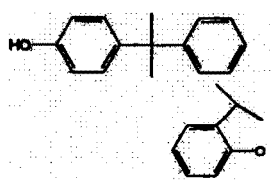
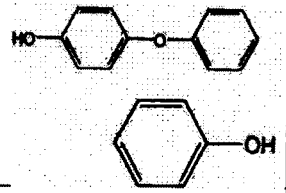
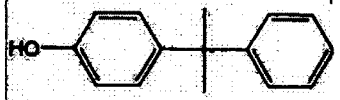
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 281	5,0		30 64,5	0,1	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005	99,0	99,0
Exemplo 282	17,3		18	0,2	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005,	95,2	90,4

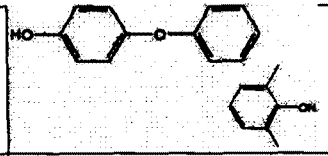
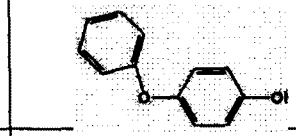
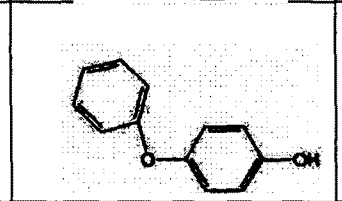
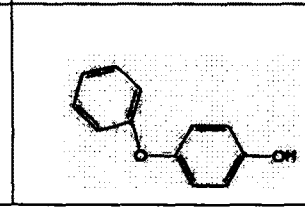
			62		dilaurato de dibutil estanho: 40 ppm, água: 0,5% em peso		
Exemplo 283	17,3		18 62	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,4	93,5
Exemplo 284	15,9		20 61	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,4	88,6
Exemplo 285	15,9		18 63	0,001	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,005, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, dilaurato de dibutil estanho: 60 ppm	97,6	87,8

Exemplo 286	13,4		68 16	0,2	Uréia: 0,01	98,4	96,4
Exemplo 287	15,6		70 12	0,4	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,015, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,015	97,6	87,9

[Tabela 66]

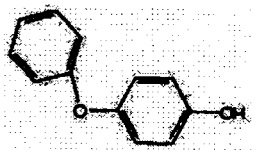
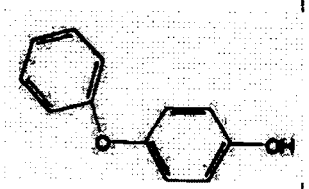
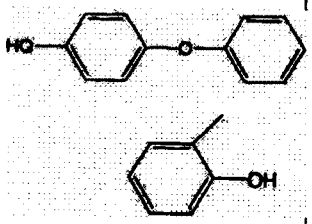
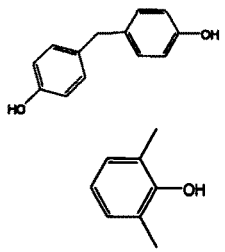
	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação do composto tendo grupos ureído após armaz. versus antes armaz. (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes armazen.)
Exemplo 288	17,1		10 70	0,3	Uréia: 0,01	97,6	87,9

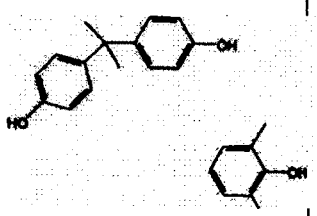
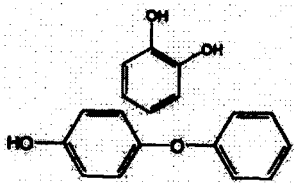
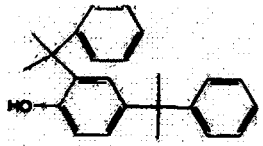
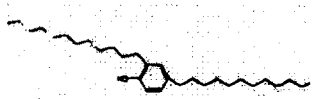
Exemplo 289	12,9		70 15	0,1	Uréia: 0,01	96,0	94,1
Exemplo 290	12,1		71	0,01	Xileno: 15% em peso, compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	96,0	94,1
Exemplo 291	14,6		68 15	0,01	Uréia: 0,01	93,6	91,7
Exemplo 292	16,5		76	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, butanol: 5% em peso	96,0	94,1
Exemplo 293	16,5		68	0,02	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002,	99,2	97,2

			12		compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005		
Exemplo 294	7,1		90	0,02	Uréia: 0,05	99,0	98,0
Exemplo 295	25,0		73	0,02	Uréia: 0,05	96,0	94,1
Exemplo 296	27,6		70	0,02	Uréia: 0,05	96,0	75,0

[Tabela 67]

	Teor de composto tendo grupos ureído na composição (% em peso)	ArOH	Teor de composto hidróxi aromático na composição (% em peso)	Teor de amônia na composição (% em peso)	Outros componentes e teores dos mesmos em composição (%)	Relação composto tendo grupos ureído após armazenamento versus antes armazenamento (% mol)	Rendimento de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído (% mol) (rend. molar versus composto tendo grupos ureído antes

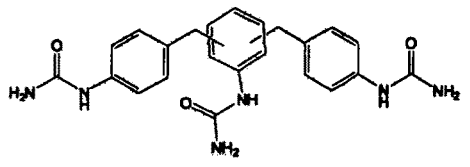
							armazen.)
Exemplo 297	43,3		52	0,001	Uréia: 0,05	96,0	25,0
Exemplo 298	33,7		62	0,001	Uréia: 0,05	96,0	38,0
Exemplo 299	19,9		63 11	0,05	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, carbonato de ditolila: 0,01	97,2	95,3
Exemplo 300	12,4		74 10	0,04	Uréia: 0,05, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,05, carbonato de dixilila: 0,06, dilaurato	74,0	66,6

					de dibutil estanho: 650 ppm		
Exemplo 301	11,1		72 10	0,01	Uréia: 0,05, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,05, carbonato de dixilila: 0,06	98,4	59,0
Exemplo 302	20,5		10 65	0,01	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005	98,4	73,8
Exemplo 303	11,1		85	0,3	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,002, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,005, uréia: 0,001	98,4	39,4
Exemplo 304	6,2		88	0,5	Compostos contendo grupo ureileno total: 0,02, compostos contendo grupo biureto terminal: 0,05, uréia: 0,01	64,0	32,0

[Exemplo 305]

Uma composição contendo 16,5% em peso de um composto tendo grupos ureído representados pela seguinte fórmula (204) (tendo sítios de reticulação de grupo de metileno diferentes, e tendo uma estrutura média na forma de uma estrutura trímero como representado pela seguinte fórmula), 81% em peso de uma composição de hidróxi aromático na forma de 4-(2-fenilpropano-2-il) fenol, 0,01% em peso de amônia e uréia em uma relação de 0,001 (referindo-se a uma relação do número de moléculas de uréia para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído, ou em outras palavras, 0,001 indica 0,003 equivalentes molares porque o composto tendo grupos ureído tem dois grupos ureído em uma molécula do mesmo) foi colocada em um vaso de armazenamento a 100 L SUS a cerca de 1/2 o volume do mesmo, seguido por substituição do interior do vaso de armazenamento com nitrogênio, e armazenando durante 1095 dias em um ambiente de armazenamento encontrado no distrito de Kojima da Cidade de Kurashiki na prefeitura de Okayama, Japão. A composição também continha outros componentes cuja estrutura não é evidente (como os compostos contendo grupos ureileno e os compostos contendo ligações de biureto terminais). Durante o período de armazenamento, o vaso foi aquecido com uma camisa de água quente circulante a 40°C (controlado em aproximadamente 30 a 50°C). Durante o período de armazenamento, a temperatura ocasionalmente caiu a cerca de 0°C ou se elevou a cerca de 50°C devido aos efeitos de falta de água, interrupções no fornecimento de energia e manutenção das instalações da fábrica. Além disso, a temperatura uma vez se elevou a cerca de 80°C devido a uma função irregular. Quando a composição foi analisada após armazenamento, o composto tendo grupos ureído estava contido na composição a 98,4% em mols como comparado com antes ao armazenamento. Após o período de armazenamento, a

composição foi aquecida a 180°C e introduzida através de um pré-aquecedor (dispositivo para pré-aquecer a composição a 230°C) na proximidade do meio da coluna de destilação de bandeja perfurada tendo um diâmetro interno de 6,35 cm e 40 placas teóricas (operação da coluna de destilação foi realizada enquanto reduzindo a pressão a partir da pressão normal para reduzir a pressão dentro de uma faixa de temperatura na fase líquida na porção inferior da coluna de destilação de 150 a 300°C e confirmando as condições de operação; a pressão mínima durante a operação foi cerca de 0,3 KPa). Um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático foi obtida a partir da porção inferior da coluna de destilação. Amônia formada como um subproduto na reação de esterificação, uma quantidade pequena de composição de hidróxi aromático, e um componente tendo um ponto de ebulição menor do que a composição de hidróxi aromático foram extraídos da porção superior da coluna de destilação (e incluído um subproduto na forma de um composto tendo um peso molecular de 178 ou menos e tendo um grupo carbonila, apesar da estrutura do mesmo ser incapaz de ser identificada). Apesar de o rendimento mudar do início até a conclusão da operação devido a flutuações em condições de operação, no maior nível de desempenho durante o período da operação, o rendimento do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído com base no composto tendo grupos ureído no início do período de armazenamento foi de 96,4% em mols. Não ocorreu entupimento de linhas durante ambos armazenamento e transferência, e a formação de sólidos dentro da coluna de destilação não foi observada.



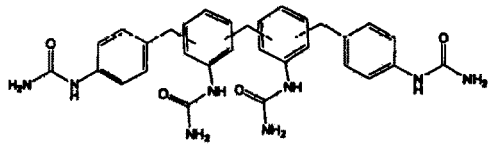
(204)

[Exemplo 306]

Uma composição contendo 12,5% em peso de um composto tendo

grupos ureído representados pela seguinte fórmula (205) (tendo sítios de reticulação de grupo de metileno diferentes, e tendo uma estrutura média na forma de uma estrutura trímero como representado pela seguinte fórmula), 85% em peso de uma composição de hidróxi aromático na forma de cresol (mistura de isômero), 0,01% em peso de amônia e uréia em uma relação de 0,001 (referindo-se a uma relação do número de moléculas de uréia para o número de grupos ureído que compõem (ou estão contidos em) o composto tendo grupos ureído, ou em outras palavras, 0,001 indica 0,004 equivalentes molares porque o composto tendo grupos ureído tem dois grupos ureído em uma molécula do mesmo) foi colocada em um vaso de armazenamento a 100 L SUS a cerca de 1/2 o volume do mesmo, seguido por substituição do interior do vaso de armazenamento com nitrogênio, e armazenando durante 1095 dias em um ambiente de armazenamento encontrado no distrito de Kojima da Cidade de Kurashiki na prefeitura de Okayama, Japão. A composição também continha outros componentes cuja estrutura não é evidente (como os compostos contendo grupos ureileno e os compostos contendo ligações de biureto terminais). Durante o período de armazenamento, o vaso foi aquecido com uma camisa de água quente circulante a 40°C (controlado em aproximadamente 30 a 50°C). Durante o período de armazenamento, a temperatura ocasionalmente caiu a cerca de 0°C ou se elevou a cerca de 50°C devido aos efeitos de falta de água, interrupções no fornecimento de energia e manutenção das instalações da fábrica. Além disso, a temperatura uma vez se elevou a cerca de 80°C devido a uma função irregular. Quando a composição foi analisada após armazenamento, o composto tendo grupos ureído estava contido na composição a 97% em mols como comparado com antes ao armazenamento. Após o período de armazenamento, a composição foi aquecida a 180°C e introduzida através de um pré-aquecedor (dispositivo para pré-aquecer a composição a 230°C) na proximidade do meio da coluna de destilação de bandeja perfurada tendo um

diâmetro interno de 6,35 cm e 40 placas teóricas (operação da coluna de destilação foi realizada enquanto reduzindo a pressão a partir da pressão normal para reduzir a pressão dentro de uma faixa de temperatura na fase líquida na porção inferior da coluna de destilação de 150 a 300°C e confirmando as condições de operação; a pressão mínima durante a operação foi cerca de 0,3 KPa). Um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído derivado do composto tendo grupos ureído e a composição de hidróxi aromático foi obtida a partir da porção inferior da coluna de destilação. Amônia formada como um subproduto na reação de esterificação, uma quantidade pequena de composição de hidróxi aromático, e um componente tendo um ponto de ebulição menor do que a composição de hidróxi aromático foram extraídos da porção superior da coluna de destilação (e incluído um subproduto na forma de um composto tendo um peso molecular de 178 ou menos e tendo um grupo carbonila, apesar da estrutura do mesmo ser incapaz de ser identificada). Apesar de o rendimento mudar do início até a conclusão da operação devido a flutuações em condições de operação, no maior nível de desempenho durante o período da operação, o rendimento do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído com base no composto tendo grupos ureído no início do período de armazenamento foi de 93% em mols. Não ocorreu entupimento de linhas durante tanto armazenamento como transferência, e a formação de sólidos dentro da coluna de destilação não foi observada.


(205)

O presente pedido é baseado em Pedidos de Patente Japonesa (Pedido de Patente Japonesa No. 2009-192250 e Pedido de Patente Japonesa No. 2009-192268) depositados junto ao Escritório de Patente Japonesa em 21 de Agosto de 2009, cujos conteúdos são incorporados aqui por referência.

Aplicabilidade Industrial

Uma vez que o método de produção de O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído da presente forma de realização inibe reações laterais e possibilita que a uréia e semelhantes usados em excesso na reação sejam eficientemente recuperados e reutilizados produzindo um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído a partir de um composto tendo grupos ureído e uma composição de hidróxi aromático, O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído pode ser produzido sem prejudicar as quantidades de uréia e amina orgânica usadas. Além disso, uma vez que vários subprodutos de reação podem ser inibidos e podem ser dissolvidos pela composição de hidróxi aromático e removidos para fora do sistema, a operação é possível durante um longo período de tempo. Ademais, uma composição para transferência e armazenamento de um composto tendo grupos ureído pode ser preferivelmente usada como uma matéria prima do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído de produção, e o O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído pode ser preferivelmente usado para produzir isocianato. Deste modo, a presente invenção é industrialmente extremamente importante.

Descrição de números de referência

(FIG. 13) - 100, 101, 102, 104, 109, 110: tanques de armazenamento, 103: tanque de agitação, 106, 111: condensadores: 107: refervedor, 108, 112: separador gás-líquido, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19: linhas

(FIG. 14) - 200, 201, 202, 204, 208, 209, 213, 216: tanques de armazenamento, 203: tanque de agitação, 206, 211: condensadores, 207, 212: separadores gás-líquido, 214, 215: refervedores, 20, 21, 22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29, 30, 31: linhas

(FIG. 15) - 110, 400, 401, 402, 404, 407: tanques de armazenamento, 408: tanque de agitação, 405: condensador, 406: separador

gás-líquido, 40, 41, 42, 43, 44, 45, 46: linhas

(FIG. 16) - 501, 504, 505: tanques de armazenamento, 502: coluna recheada, 503: condensador: 507: separador gás-líquido, 506: refervedor, 51, 52, 53, 54: linhas

(FIG. 17) -601, 603, 608, 612, 614: tanques de armazenamento, 602: aparelho de destilação de película fina, 604, 609: colunas recheadas, 605, 610: condensadores, 606, 611: separadores gás-líquido, 607, 613: refervedores, 60, 61, 62, 63, 64, 65, 66, 67, 68, 69, 70, 71: linhas

(FIG. 18) -1001, 1003, 1008, 1013, 1019: tanques de armazenamento, 1002: aparelho de destilação de película fina, 1004, 1009: colunas recheadas, 1005, 1010, 1015: condensadores, 1007, 1012, 1017: refervedores, 1006, 1011, 1016: separadores gás-líquido, A1, A2, A3, A4, A5, A6, A7, A8, A9, A10, A11, A12, A13, A14, A15: linhas

(FIG. 19) -1100, 1101, 1102, 1105: tanques de armazenamento, 1103: tanque de agitação, 1104: aparelho de filtragem pressurizada, B0, B1, B2, B3: linhas

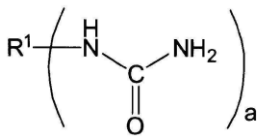
(FIG. 20) -1201, 1205, 1207: tanques de armazenamento, 1202: coluna recheada, 1204: separador gás-líquido, 1206: refervedor, C1, C2, C3, C4: linhas

(FIG. 21) -1300, 1301, 1305, 1307: tanques de armazenamento, 1302: coluna recheada, 1303: condensador, 1304: separador gás-líquido, D1, D2, D3, D4, D5, D6: linhas

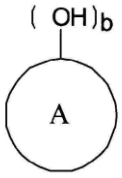
(FIG. 22) -1401: tubo de síntese de uréia, 1402: separador de pressão elevada, 1403: condensador, E1, E2, E3, E4, E5, E6, E7, E8: linhas

REIVINDICAÇÕES

1. Método para produzir pelo menos um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em que O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído refere-se a um éster de ácido carbâmico N-substituído em que átomos de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) são ligados a um anel aromático derivado de um composto tendo um grupo ureído representado pela seguinte fórmula (1) e uma composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2), o método caracterizado pelo fato de compreender a etapa de realizar esterificação ou esterificação e transesterificação a partir do composto tendo o grupo ureído e a composição de hidróxi aromático:



(1)



(2)

(em que

R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número a de grupo(s) ureído, e o a representa um inteiro de 1 a 10, e

anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo aromático substituído por número b de grupo(s) hidróxi em local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas, e que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e é substituído por pelo menos um substituinte, e o b representa um inteiro de 1 a 6;

em que pelo menos um substituinte é selecionado dentre

(i) um átomo de hidrogênio,

(ii) um grupo composto de átomos de carbono e átomos de

hidrogênio (que também podem formar uma estrutura de anel por ligação com anel A),

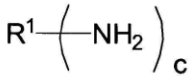
(iii) um grupo composto de átomos de carbono, átomos de hidrogênio e átomos de oxigênio, mas excluindo um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo metina terminal e um grupo OH alcoólico ou um grupo carboxila,

(iv) um átomo de halogênio e

(v) um grupo composto de átomos selecionados dentre átomos de carbono, átomos de hidrogênio, átomos de oxigênio, átomos de nitrogênio, átomos de enxofre, átomos de halogênio, mas excluindo um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo metina terminal e um grupo OH alcoólico ou um grupo carboxila, grupo NH_2, grupo NH, grupo NOH, grupo SH, grupo SO_3H e ou grupo SOH.

2. Método de produção de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de que o composto tendo o grupo ureído é um composto tendo um grupo ureído obtido por um processo compreendendo a seguinte etapa A:

etapa (A): uma etapa de obter pelo menos um tipo de composto tendo um grupo ureído derivado de uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (3) e ureia por ureidação da amina primária orgânica e a ureia em uma fase líquida e eliminando ou extraindo para uma fase gasosa a amônia formada como um subproduto na reação de ureidação:



(3)

(em que

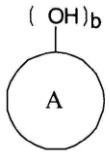
R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número

c de grupo(s) NH_2, e o c representa um inteiro de 1 a 10.

3. Método de produção de acordo com a reivindicação 2, caracterizado pelo fato de que a amina primária orgânica é uma monoamina primária orgânica ou uma diamina primária orgânica.

4. Método de produção de acordo com a reivindicação 2, caracterizado pelo fato de que a etapa (A) é realizada na presença de água e/ou álcool e/ou uma composição hidroxila aromática contendo pelo menos um tipo de composto hidroxila aromático.

5. Método de produção de acordo com a reivindicação 2, caracterizado pelo fato de que a etapa (A) é realizada na presença de uma composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2):



(2)

(em que

anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo aromático substituído por número b de grupo(s) hidróxi em um local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas, que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e pode ser substituído por outros substituintes, e o b representa um inteiro de 1 a 6).

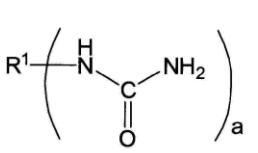
6. Método de produção de acordo com a reivindicação 2, caracterizado pelo fato de que a etapa (A) é realizada na presença de um álcool representado pela seguinte fórmula (4):

R^2OH (4)

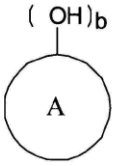
(em que

R^2 representa um grupo alifático, ou um grupo alifático em que um grupo aromático é ligado, que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 14, e o grupo OH do álcool representado por fórmula (4) é um grupo OH que não é ligado a um anel aromático).

7. Composição para transferência e armazenamento de um composto tendo um grupo ureído, caracterizada pelo fato de que o número de moléculas de pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2) em uma composição de hidróxi aromático que contém o composto hidróxi aromático, com base no número do grupo ureído contido no composto tendo o grupo ureído representado pela seguinte fórmula (1) na composição, é um inteiro de 1 a 100:



(1)



(2)

(em que

R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número a de grupo(s) ureído, e o a representa um inteiro de 1 a 10, e

anel A representa um grupo orgânico, que contém um grupo aromático substituído por número b de grupo(s) hidróxi em local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas, e que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50, pode ser um anel heterocíclico simples ou múltiplo, e é substituído por pelo menos um substituinte, e o b representa um inteiro de 1 a 6;

em que pelo menos um substituinte é selecionado dentre

(i) um átomo de hidrogênio,

(ii) um grupo composto de átomos de carbono e átomos de hidrogênio que também podem formar uma estrutura de anel por ligação com anel A,

(iii) um grupo composto de átomos de carbono, átomos de hidrogênio e átomos de oxigênio, mas excluindo um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo metina terminal e um grupo OH alcoólico ou um grupo carboxila,

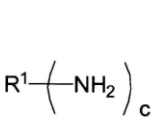
(iv) um átomo de halogênio e

(v) um grupo composto de átomos selecionados dentre átomos de carbono, átomos de hidrogênio, átomos de oxigênio, átomos de nitrogênio, átomos de enxofre, átomos de halogênio, mas excluindo um grupo carbonila, um grupo éster, um grupo metina terminal e um grupo OH alcoólico ou um grupo carboxila, grupo NH_2, grupo NH, grupo NOH, grupo SH, grupo SO_3H e ou grupo SOH.

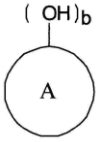
8. Método de produção de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de ainda compreender as seguintes etapas (A) e (B):

etapa (A): uma etapa de obter pelo menos um tipo de composto tendo um grupo ureído derivado de uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (3) como definida na reivindicação 2 e ureia por ureidação da amina primária orgânica e a ureia em uma fase líquida e eliminando ou extraindo para uma fase gasosa a amônia formada como um subproduto na reação de ureidação, e

etapa (B): uma etapa de obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo o pelo menos um tipo de composto tendo o grupo ureído e a composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2) como definida na reivindicação 1, em uma fase líquida, e extraindo amônia formada como um subproduto para uma fase gasosa:



(3)



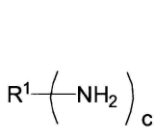
(2)

9. Método de produção de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de ainda compreender as seguintes etapas (A), (R) e (P):

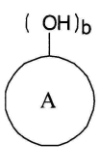
etapa (A): uma etapa de obter pelo menos um tipo de composto tendo um grupo ureído derivado de uma amina primária orgânica representada pela seguinte fórmula (3) como definida na reivindicação 2 e ureia por ureidação a amina primária orgânica e a ureia em uma fase líquida e eliminando ou extraindo para uma fase gasosa a amônia formada como um subproduto na reação de ureidação,

etapa (R): uma etapa de obter O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo o pelo menos um tipo de composto tendo o grupo ureído e um álcool representado pela seguinte fórmula (4) em uma fase líquida e extraindo amônia formada como um subproduto para uma fase gasosa (em que o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído representa um éster de ácido carbâmico N-substituído em que átomos de oxigênio do grupo ácido carbâmico (-NHCOO-) são ligados a um grupo R^2 derivado de um álcool), e

etapa (P): uma etapa de obter O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído reagindo o O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído e a composição de hidróxi aromático contendo pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (2) como definida na reivindicação 1 em uma fase líquida e extraindo álcool formado como um subproduto para uma fase gasosa:



(3)



(2)

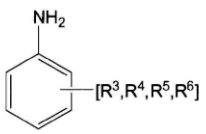
R^2OH (4)

(em que

R^2 representa um grupo alifático, ou um grupo alifático em que um grupo aromático é ligado, que contém um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 14, e o grupo OH do álcool representado por fórmula (4) é um grupo OH que não é ligado a um anel aromático).

10. Método de produção de acordo com a reivindicação 8 ou 9, caracterizado pelo fato de que a amina primária orgânica é uma monoamina primária orgânica aromática representada pela seguinte fórmula (5), uma etapa (C) seguinte é realizada após a etapa (B), após a etapa (R) ou após a etapa (P), e O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com um grupo metileno (-CH_2-), é obtido a partir do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído obtido na etapa (B), uma etapa (R) ou a etapa (P):

etapa (C): uma etapa de obter O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído, em que pelo menos duas moléculas do O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído são reticuladas com um grupo metileno (-CH_2-), reagindo o O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com formaldeído ou um agente de reticulação metilenante e grupos aromáticos de reticulação derivados de monoamina primária orgânica aromática contida no O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído com o grupo metileno (-CH_2-) em que o O-(R^2 ou aril) éster de ácido carbâmico N-substituído representa um O-R^2 éster de ácido carbâmico N-substituído ou um O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído:



(5)

(em que

pelo menos um local na posição orto e/ou posição para do grupo NH_2 de uma monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) não é substituída, grupos R^3 a R^6 respectivamente representam um grupo substituído em um local arbitrário que mantém propriedades aromáticas do anel, grupos R^3 a R^6 podem respectivamente e independentemente substituir um anel aromático ou grupos R^3 a R^6 podem juntos ligar para formar um anel com um anel aromático, grupos R^3 a R^6 são átomos de hidrogênio ou grupos selecionados dentre o grupo consistindo de grupos em que um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila e um grupo arila tendo um grupo hidróxi é ligado por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, o número de átomos de carbono de grupos R^3 a R^6 é um número inteiro dentro de uma faixa de 0 a 7, e um número total de átomos de carbono que compõe a monoamina primária orgânica aromática representada por fórmula (5) é um inteiro de 6 a 13).

11. Método de produção de acordo com a reivindicação 8 ou 9, caracterizado pelo fato de compreender a etapa de recuperar ureia realizando a seguinte etapa (D) antes da etapa (B) ou a etapa (P) e/ou simultâneo à etapa (B) ou à etapa (P):

etapa (D): uma etapa de remover ureia por destilação ou sublimação.

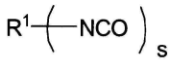
12. Método de produção de acordo com a reivindicação 8 ou 9, caracterizado pelo fato de compreender a seguinte etapa (E) de reciclar a ureia recuperada à etapa (A):

etapa (E): uma etapa de reciclar ureia recuperada em etapa (D) para etapa (A).

13. Método de produção de acordo com a reivindicação 1, caracterizado pelo fato de compreender a etapa de obter um isocianato representado pela seguinte fórmula (6), que é derivado do O-aril éster de ácido

carbâmico N-substituído, e uma composição de hidróxi aromático realizando decomposição térmica no O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído em uma etapa (F) seguinte:

etapa (F): uma etapa de obter um isocianato e uma composição de hidróxi aromático a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído:



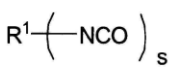
(6)

em que

R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número s de Grupo(s) NCO, e o s representa um inteiro de 1 a 10.

14. Método de produção de acordo com a reivindicação 8 ou 9, caracterizado pelo fato de compreender a etapa de obter um isocianato representado pela seguinte fórmula (6), que é derivada do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático realizando decomposição térmica do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído na seguinte etapa (F);

etapa (F): uma etapa de obter um isocianato de um composição de hidróxi aromático a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído:

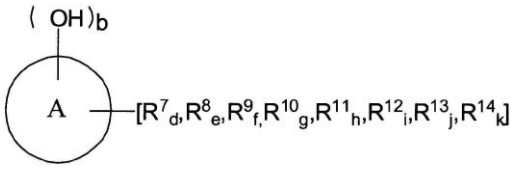


(6)

em que

R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número s de grupo(s) NCO, e o s representa um inteiro de 1 a 10; e a etapa de separar a composição de hidróxi aromático obtida na etapa (F) a partir do isocianato, e reciclar a composição de hidróxi aromático à etapa (A) e/ou à etapa (B), ou à etapa (A) e/ou à etapa (R) e/ou à etapa (P).

15. Método de produção de acordo com qualquer uma de reivindicações 1, 8 e 9, caracterizado pelo fato de que um composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático é pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (7):



(7)

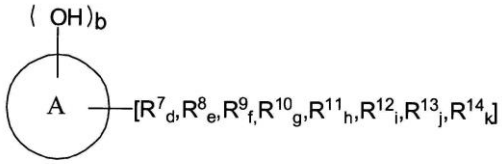
(em que

anel A representa um anel aromático selecionado dentre um anel benzeno, um anel naftaleno e um anel antraceno, os grupos OH e grupos R^7 a R^{14} respectivamente representam grupos substituídos em local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas de anel A, grupos R^7 a R^{14} podem respectivamente e independentemente substituir anel A, grupos R^7 a R^{14} podem ligar-se juntos para formar um anel com um anel aromático por ligação ao anel A, grupos R^7 a R^{14} respectivamente e independentemente representam um átomo de hidrogênio, um átomo de halogênio ou um grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila, um grupo arila tendo um grupo hidróxi, um grupo aralquila e um grupo éter que é um grupo alquil éter substituído e/ou não substituído e/ou aril éter substituído e/ou não substituído e/ou aralquil éter substituído e/ou não substituído, e/ou um grupo ao qual um ou mais tipos de grupos selecionados dentre o grupo são ligadas, e/ou um grupo ao qual um ou mais tipos de grupos selecionados dentre o grupo são ligados por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, e anel A e grupos R^7 a R^{14} são compostas de um número total integral de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50,

b representa um inteiro de 1 a 6, d, e, f, g, h, i, j e k representam inteiros a partir de 0 a 5, o valor de d + e + f + g + h + i + j + k representa um

inteiro igual a 6-b no caso anel A é o anel benzeno, representa um inteiro igual a 8-b no caso anel A é o anel naftaleno, ou representa um inteiro igual a 10-b no caso anel A é o anel antraceno, e um grupo selecionado dentre grupos R^7 a R^{14} como descrito acima podem ser ciclicamente ligados um anel A por ligações carbono-carbono e/ou ligações de éter.

16. Composição para transferência e armazenamento do composto tendo o grupo ureído de acordo com a reivindicação 7, caracterizada pelo fato de que o composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático é pelo menos um tipo de composto hidróxi aromático representado pela seguinte fórmula (7):



(7)

(em que

anel A representa um anel aromático selecionado dentre um anel benzeno, um anel naftaleno e um anel antraceno, os grupos OH e grupos R^7 a R^{14} respectivamente representam grupos substituídos em local(s) arbitrário(s) que mantém propriedades aromáticas de anel A, grupos R^7 a R^{14} podem respectivamente e independentemente substituir anel A, grupos R^7 a R^{14} podem ligar-se juntos para formar um anel com um anel aromático por ligação ao anel A, grupos R^7 a R^{14} respectivamente e independentemente representam um átomo de hidrogênio, átomo de halogênio ou grupo selecionado dentre o grupo consistindo de um grupo alquila, um grupo cicloalquila, um grupo arila, um grupo arila tendo um grupo hidróxi, um grupo aralquila e um grupo éter que é um grupo alquil éter substituído e/ou não substituído e/ou aril éter substituído e/ou não substituído e/ou aralquil éter substituído e/ou não substituído, e/ou um grupo ao qual um ou mais tipos de grupos selecionados dentre o grupo são

ligados, e/ou um grupo ao qual um ou mais tipos de grupos selecionados dentre o grupo são ligados por ligações alifáticas saturadas e/ou ligações de éter, e anel A e grupos R^7 a R^{14} são compostos de um número total integral de átomos de carbono dentro de uma faixa de 6 a 50,

b representa um inteiro de 1 a 6, d, e, f, g, h, i, j e k representam inteiros a partir de 0 a 5, o valor de d + e + f + g + h + i + j + k representa um inteiro igual a 6-b no caso anel A é o anel benzeno, representa um inteiro igual a 8-b no caso anel A é o anel naftaleno, ou representa um inteiro igual a 10-b no caso anel A é o anel antraceno, e um grupo selecionado dentre grupos R^7 a R^{14} como descrito acima podem ser ciclicamente ligados um anel A por ligações carbono-carbono e/ou ligações de éter).

17. Método de produção de acordo com qualquer uma de reivindicações 2, 8 e 9, caracterizado pelo fato de que o composto hidróxi aromático que compõe a composição de hidróxi aromático tem um ponto de ebulição padrão que difere por 10°C ou mais a partir do ponto de ebulição padrão de um isocianato tendo uma estrutura em que todos os grupos amino da amina primária orgânica, grupos amino primários, são convertidos em grupos isocianato.

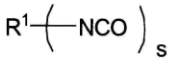
18. Método de produção de acordo com qualquer uma de reivindicações 1, 8 e 9, caracterizado pelo fato de que o composto hidróxi aromático contido no composição de hidróxi aromático é um composto hidróxi aromático monovalente e/ou divalente, isto é, aquele em que b é 1 e/ou 2.

19. Composição para transferência e armazenamento do composto tendo o grupo ureído de acordo com a reivindicação 7, caracterizada pelo fato de que o composto hidróxi aromático contido na composição de hidróxi aromático é um composto hidróxi aromático monovalente e/ou divalente, isto é, aquele em que b é 1 e/ou 2.

20. Método de produção de acordo com a reivindicação 18,

caracterizado pelo fato de compreender a etapa de obter um isocianato representado pela seguinte fórmula (6), que é derivada do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído e uma composição de hidróxi aromático realizando decomposição térmica do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído na seguinte etapa (F);

etapa (F): uma etapa de obter um isocianato de um composição de hidróxi aromático a partir do O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído:



(6)

em que

R^1 representa um grupo orgânico contendo um número inteiro de átomos de carbono dentro de uma faixa de 1 a 85, que é substituído por número s de grupo(s) NCO, e o s representa um inteiro de 1 a 10; e reciclar O-aril éster de ácido carbâmico N-substituído não reagido que não foi termicamente decomposto na etapa (F), para a etapa (A) e/ou a etapa (B) e/ou a etapa (R) e/ou a etapa (P) e/ou a etapa (F).

21. Método de produção de acordo com a reivindicação 8 ou 9, caracterizado pelo fato de ainda compreender a seguinte etapa (G) de recuperar amônia formada como um subproduto na etapa (A) e/ou na etapa (B) e/ou na etapa (R); regenerar ureia reagindo a amônia com dióxido de carbono; e reciclar a ureia à etapa (A):

etapa (G): uma etapa de recuperar amônia formada como um subproduto, regenerar ureia reagindo a amônia com dióxido de carbono, e reciclar a ureia para etapa (A).

FIG.1

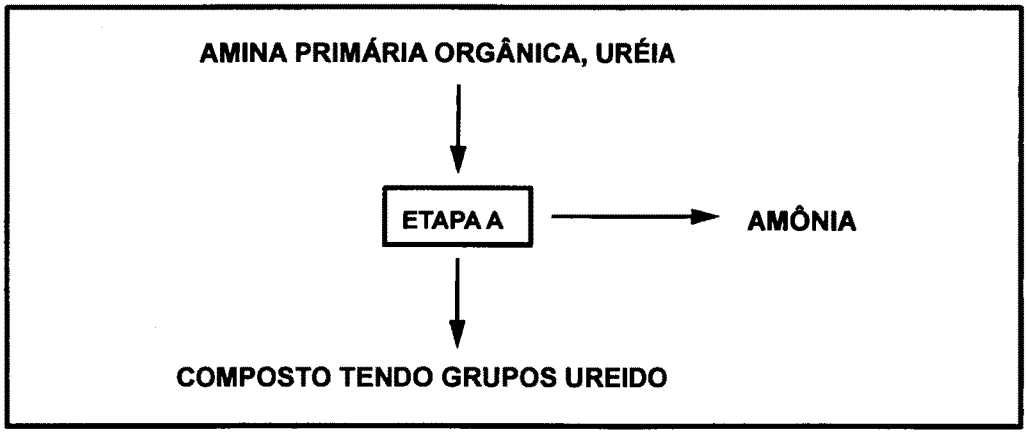

AMINA PRIMÁRIA ORGÂNICA, URÉIA
ETAPA A
AMÔNIA
COMPOSTO TENDO GRUPOS UREIDO

FIG.2

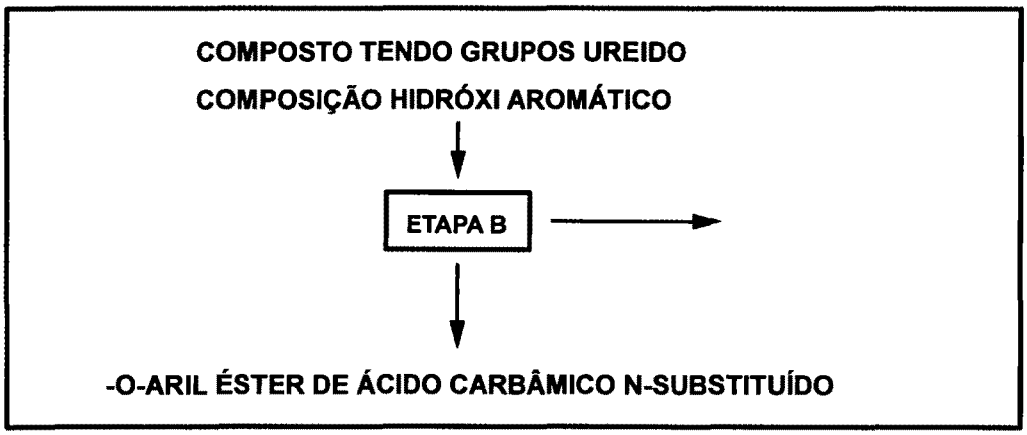

COMPOSTO TENDO GRUPOS UREIDO
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ETAPA B
-O-ARIL ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO

FIG.3

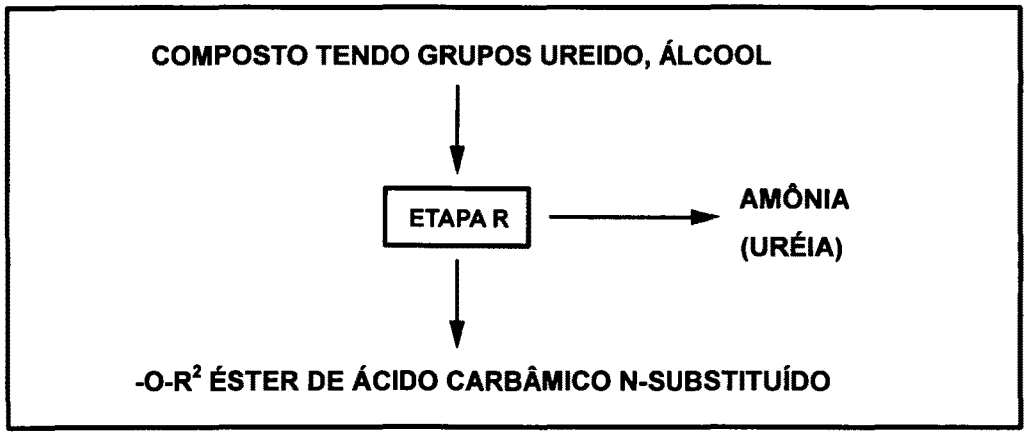

COMPOSTO TENDO GRUPOS UREIDO, ÁLCOOL
ETAPA R
AMÔNIA
(URÉIA)
-O-R2 ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO

FIG.4

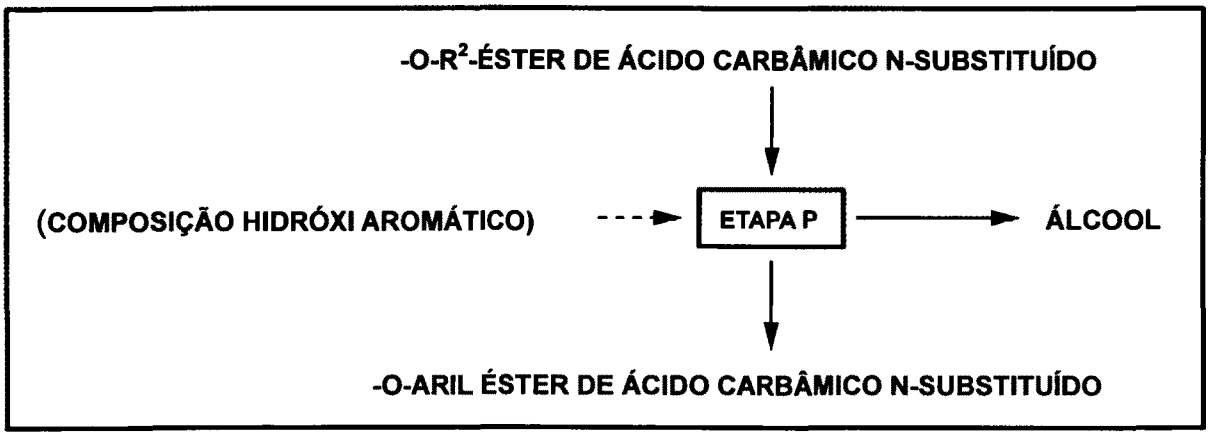

-O-R2-ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO
(COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO)
ETAPA P
ÁLCOOL
-O-ARIL ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO

FIG.5

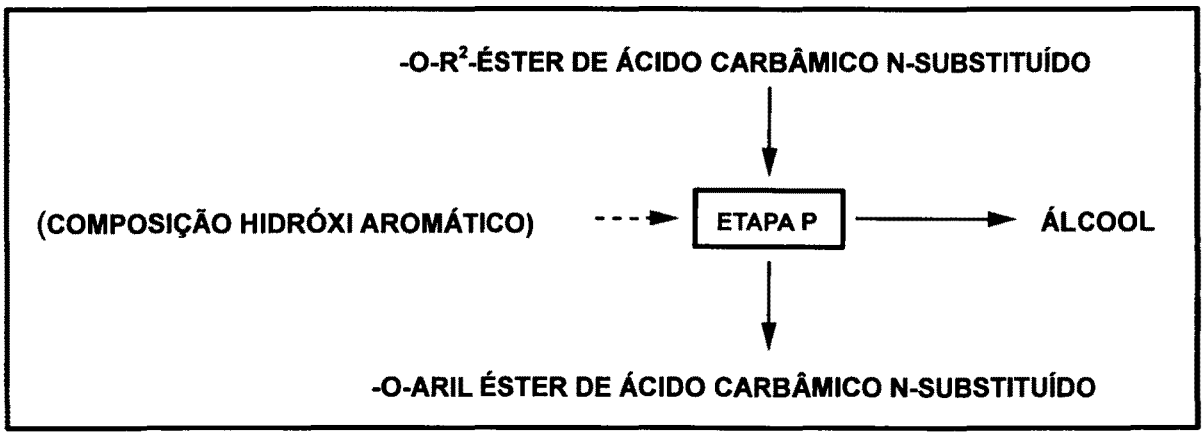

-O-R²-ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO
(COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO)
ETAPA P
ÁLCOOL
-O-ARIL ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO

FIG.6

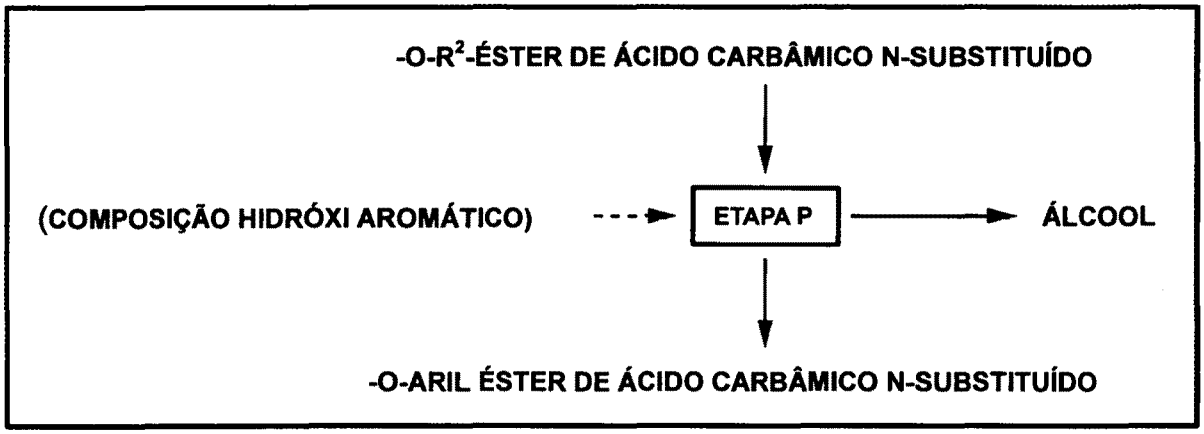

-O-R²-ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO
(COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO)
ETAPA P
ÁLCOOL
-O-ARIL ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO

FIG.7

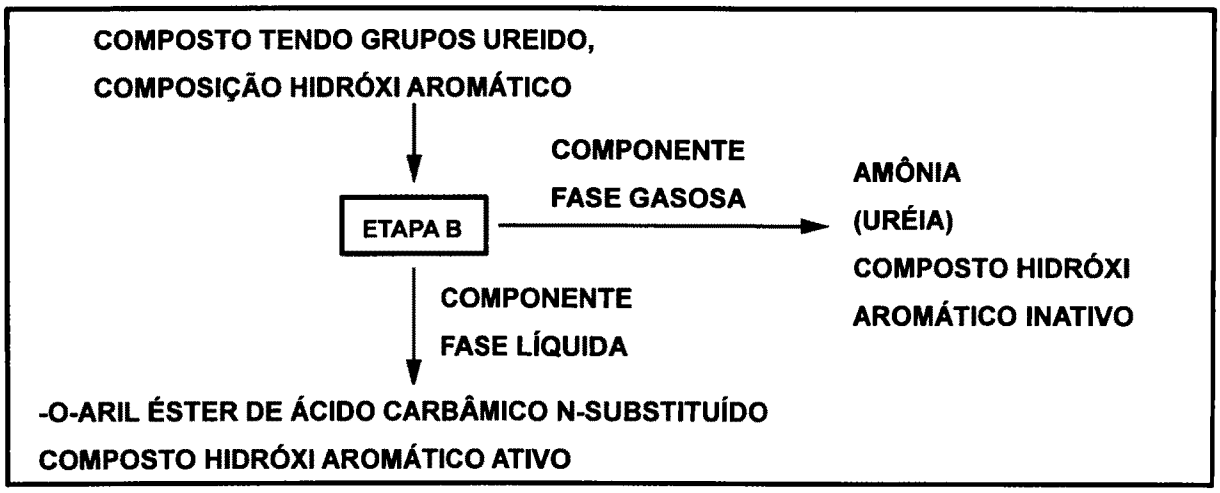

COMPOSTO TENDO GRUPOS UREIDO,
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ETAPA B
COMPONENTE
FASE GASOSA
AMÔNIA
(URÉIA)
COMPOSTO HIDRÓXI
AROMÁTICO INATIVO
COMPONENTE
FASE LÍQUIDA
-O-ARIL ÉSTER DE ÁCIDO CARBÂMICO N-SUBSTITUÍDO
COMPOSTO HIDRÓXI AROMÁTICO ATIVO

FIG.8

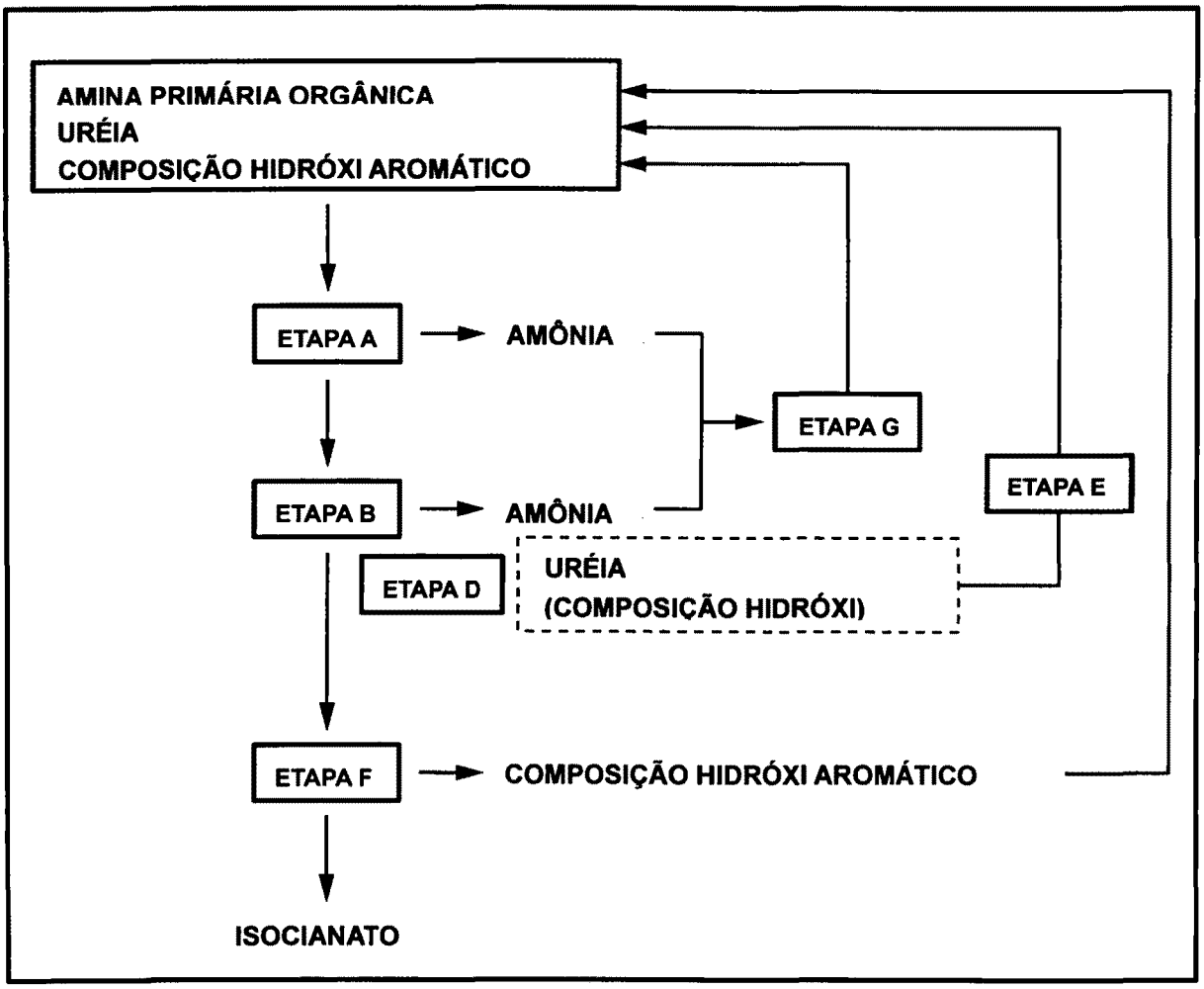

AMINA PRIMÁRIA ORGÂNICA
URÉIA
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ETAPA A
AMÔNIA
ETAPA G
ETAPA B
AMÔNIA
ETAPA E
ETAPA D
URÉIA
(COMPOSIÇÃO HIDRÓXI)
ETAPA F
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ISOCIANATO

FIG.9

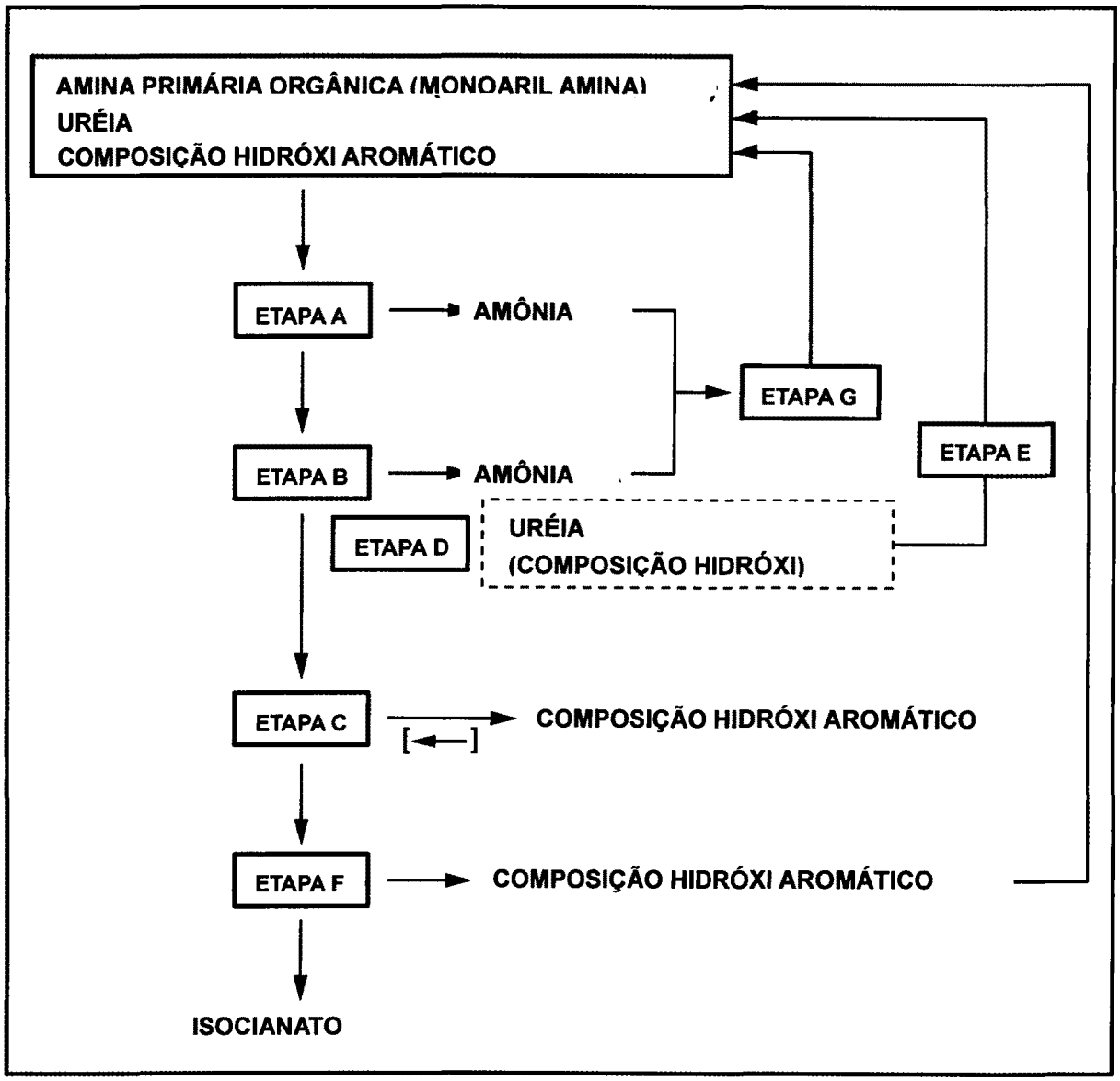

AMINA PRIMÁRIA ORGÂNICA (MONOARIL AMINA)
URÉIA
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ETAPA A
AMÔNIA
ETAPA G
ETAPA B
AMÔNIA
ETAPA E
ETAPA D
URÉIA
(COMPOSIÇÃO HIDRÓXI)
ETAPA C
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ETAPA F
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ISOCIANATO

FIG.10

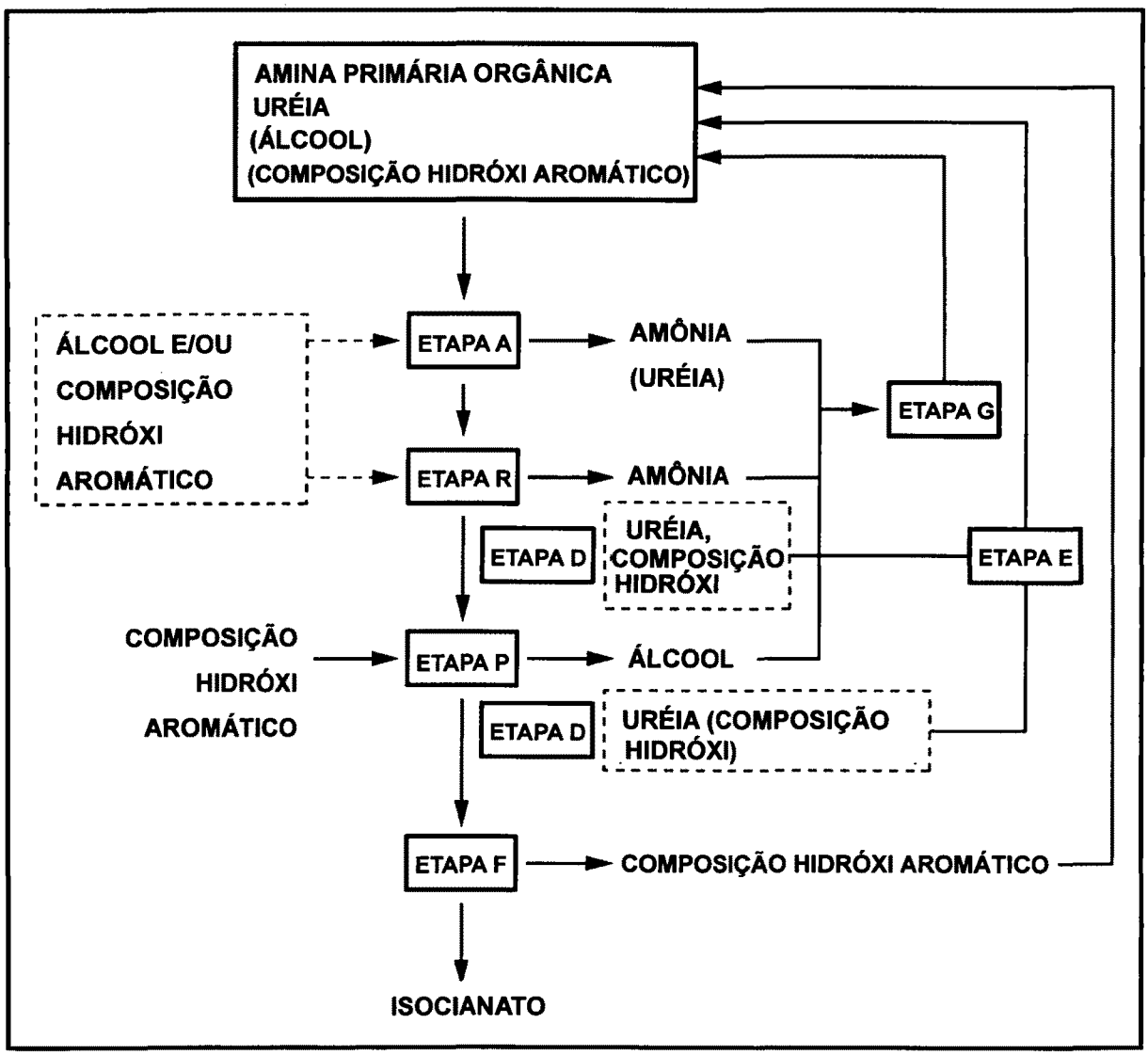

AMINA PRIMÁRIA ORGÂNICA
URÉIA
(ÁLCOOL)
(COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO)
ÁLCOOL E/OU
COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI
AROMÁTICO
ETAPA A
AMÔNIA
(URÉIA)
ETAPA G
ETAPA R
AMÔNIA
ETAPA D
URÉIA,
COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI
ETAPA E
COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI
AROMÁTICO
ETAPA P
ÁLCOOL
ETAPA D
URÉIA (COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI)
ETAPA F
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ISOCIANATO

FIG.11

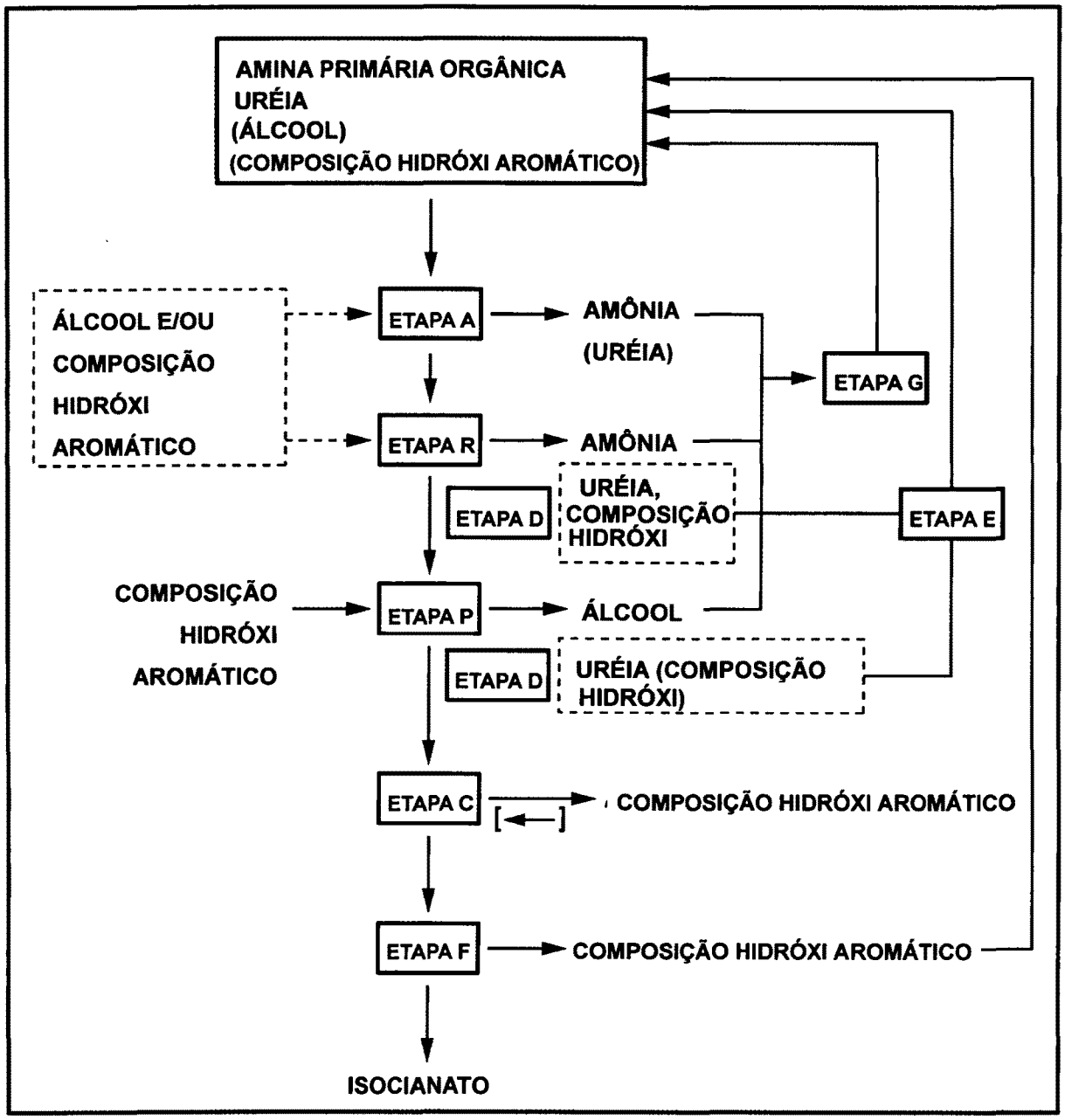

AMINA PRIMÁRIA ORGÂNICA
URÉIA
(ÁLCOOL)
(COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO)
ÁLCOOL E/OU
COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI
AROMÁTICO
ETAPA A
AMÔNIA
(URÉIA)
ETAPA G
ETAPA R
AMÔNIA
ETAPA D
URÉIA,
COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI
ETAPA E
COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI
AROMÁTICO
ETAPA P
ÁLCOOL
ETAPA D
URÉIA (COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI)
ETAPA C
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ETAPA F
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ISOCIANATO

FIG.12

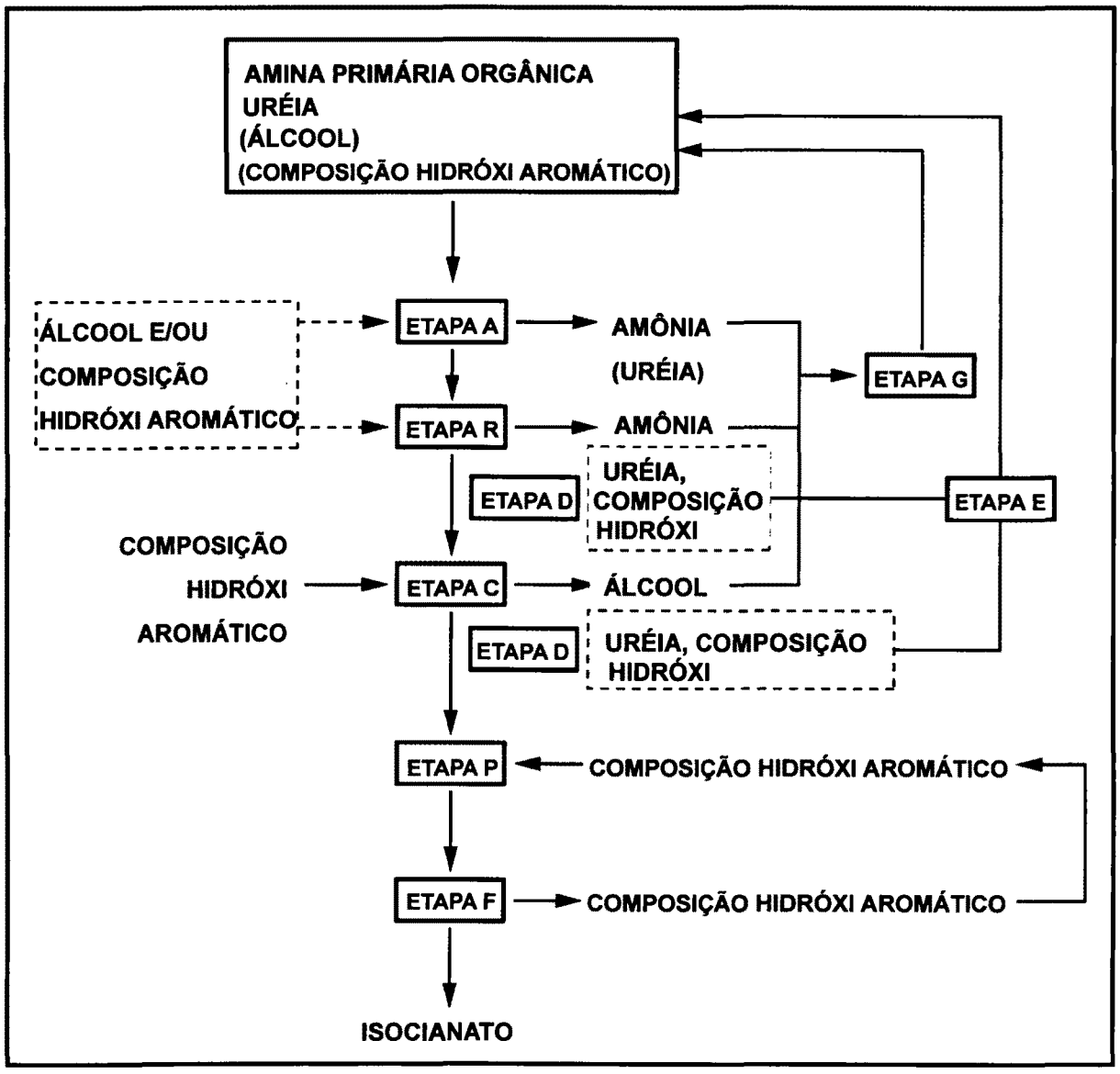

AMINA PRIMÁRIA ORGÂNICA
URÉIA
(ÁLCOOL)
(COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO)
ÁLCOOL E/OU
COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI AROMÁTICO
ETAPA A
AMÔNIA
(URÉIA)
ETAPA G
ETAPA R
AMÔNIA
ETAPA D
URÉIA,
COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI
ETAPA E
COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI
AROMÁTICO
ETAPA C
ÁLCOOL
ETAPA D
URÉIA, COMPOSIÇÃO
HIDRÓXI
ETAPA P
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ETAPA F
COMPOSIÇÃO HIDRÓXI AROMÁTICO
ISOCIANATO

FIG. 13

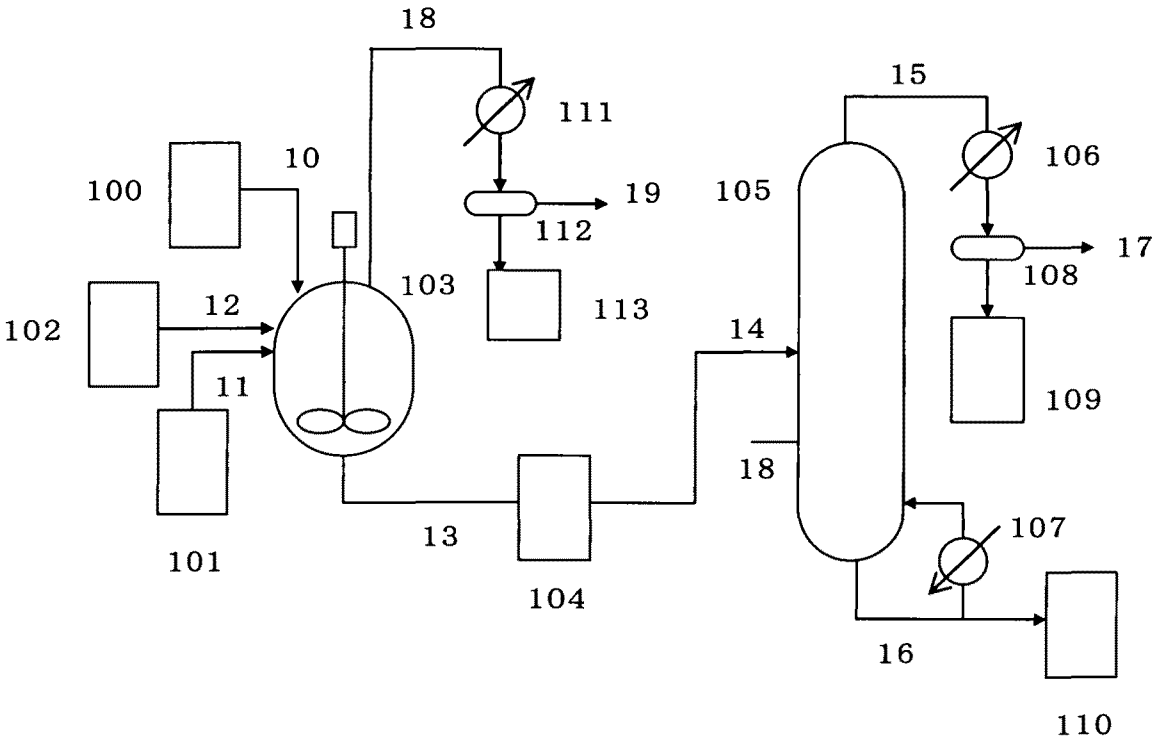

18
111
15
100
10
19
105
106
112
17
103
108
102
12
113
14
109
11
18
101
13
104
107
16
110

FIG. 14

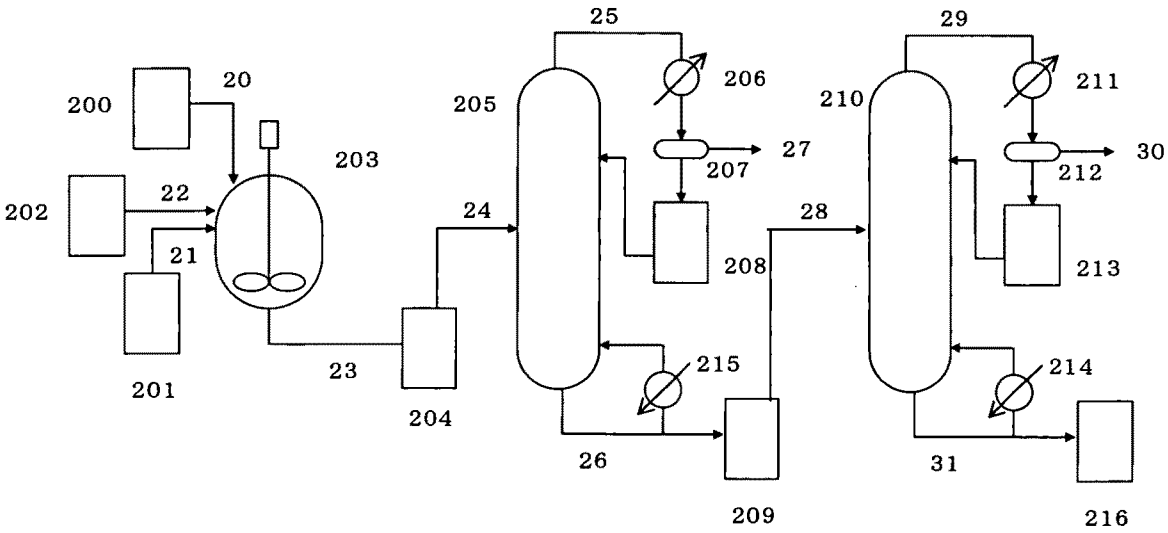

200
20
202
22
21
201
203
23
204
24
205
25
206
207
27
208
209
26
28
210
29
211
212
30
213
214
31
215
216

FIG. 15

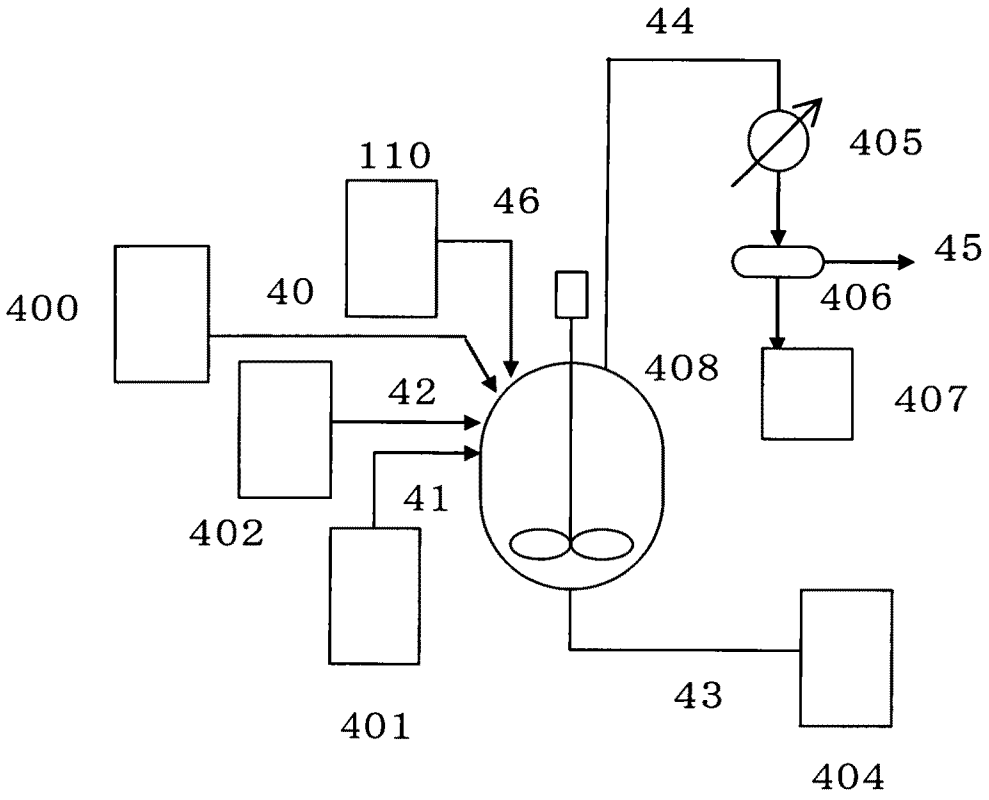


FIG. 16

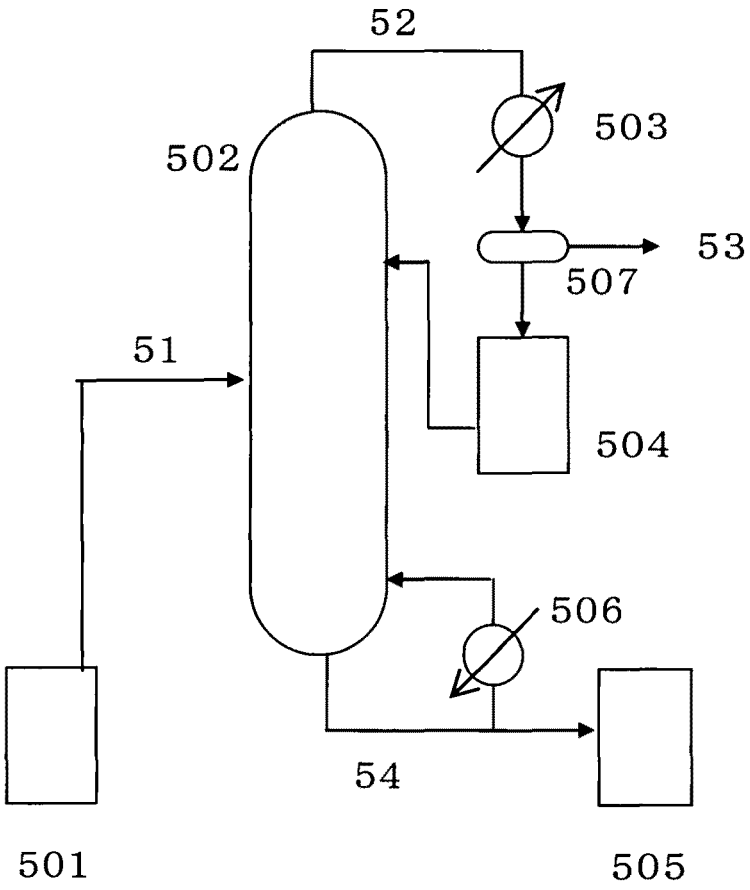


FIG. 17

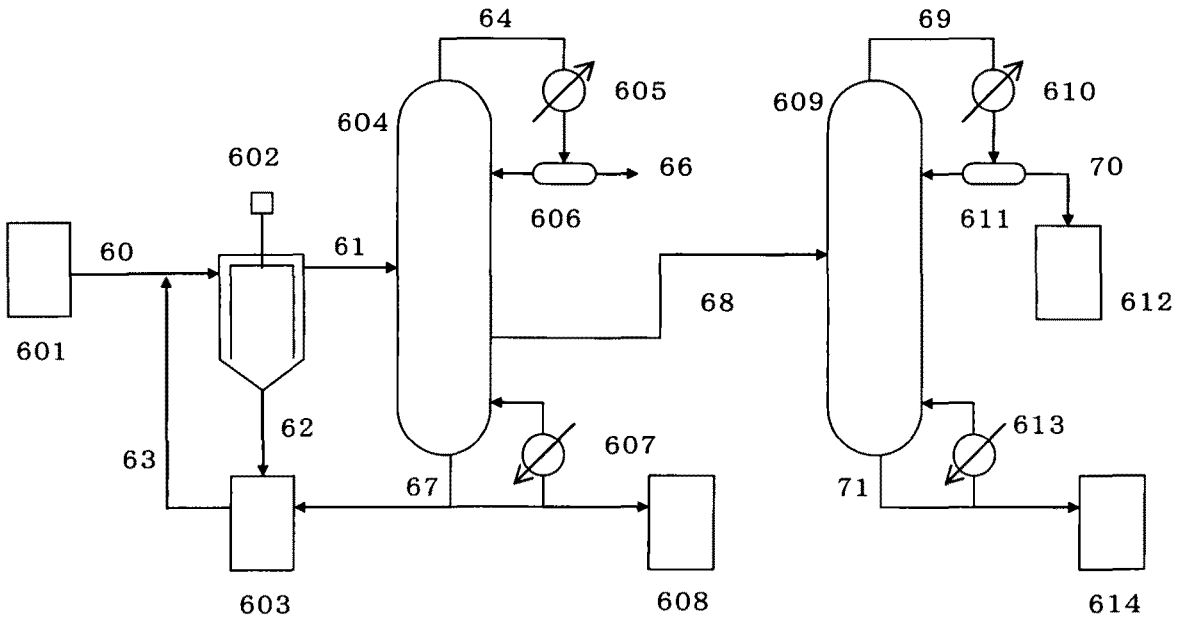

64
605
604
602
66
606
60
61
601
68
62
63
607
67
603
608
69
609
610
70
611
612
613
71
614

FIG. 18

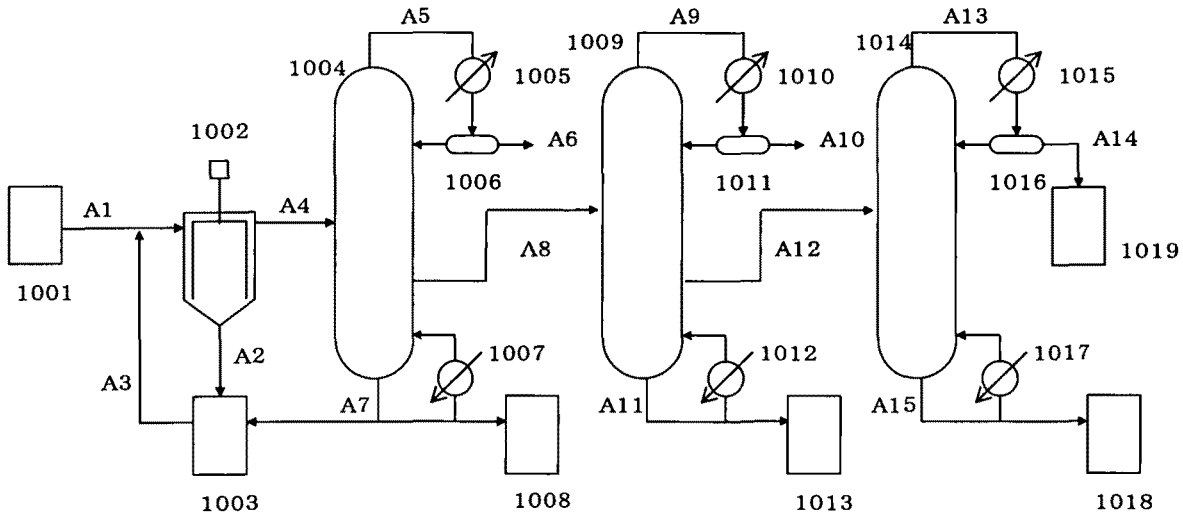

A5
1004
1005
A9
1009
1010
A13
1014
1015
1002
A6
1006
A10
1011
A14
1016
A1
A4
A8
A12
1019
1001
A2
1007
1012
1017
A3
A7
A11
A15
1003
1008
1013
1018

FIG. 19

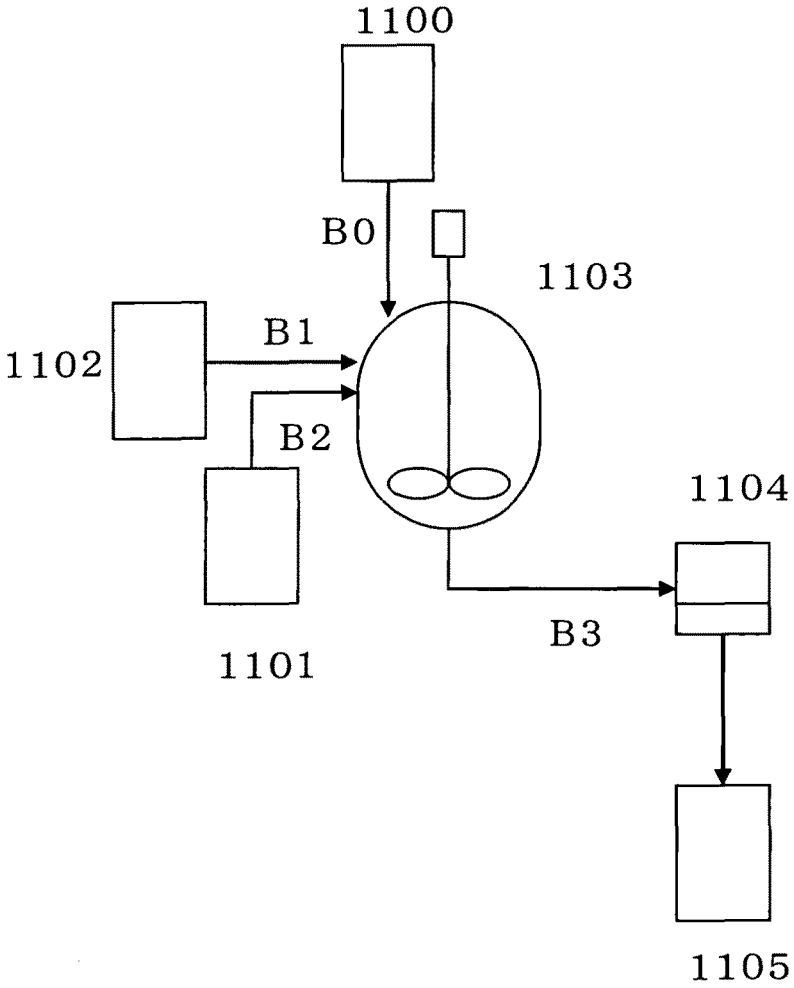


FIG. 20

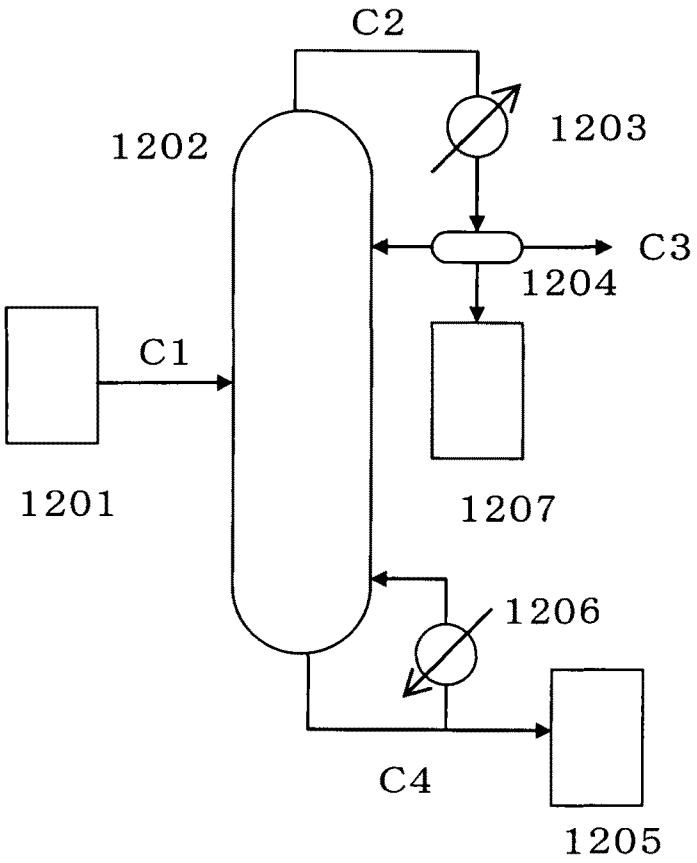


FIG. 21

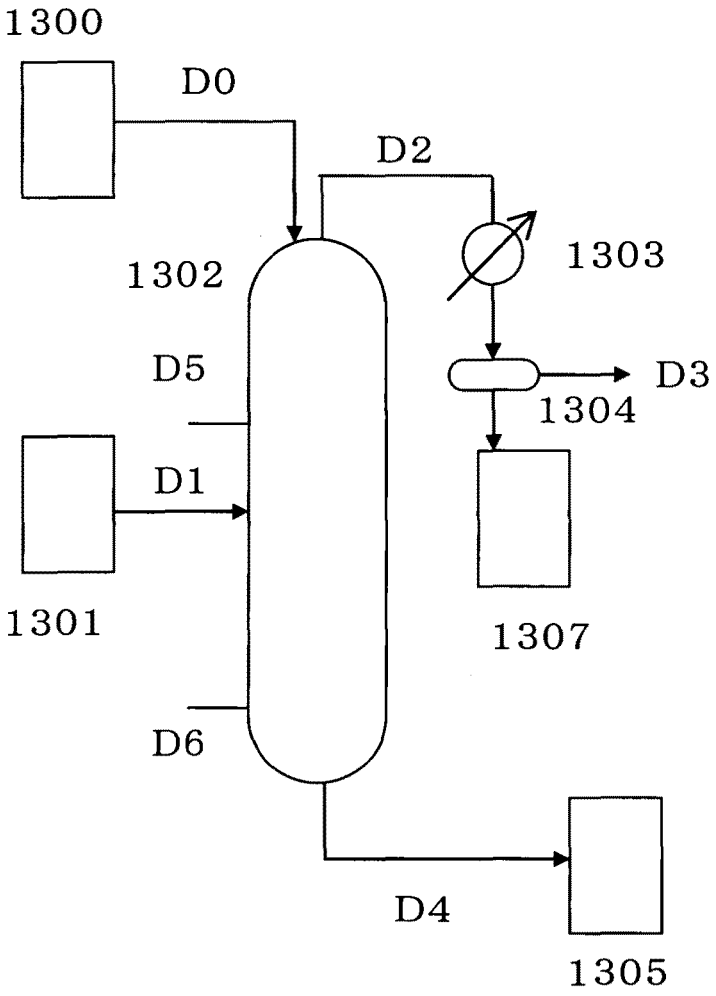


FIG. 22

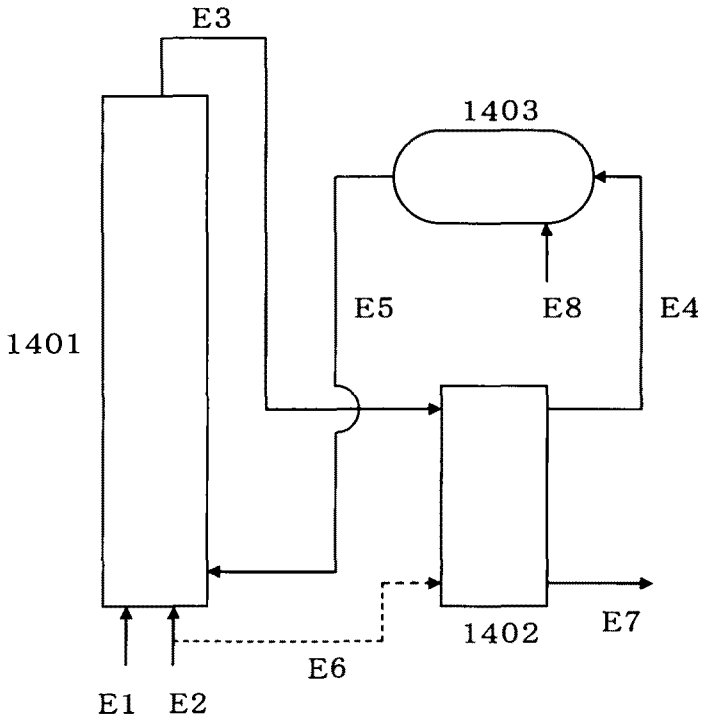


FIG. 23

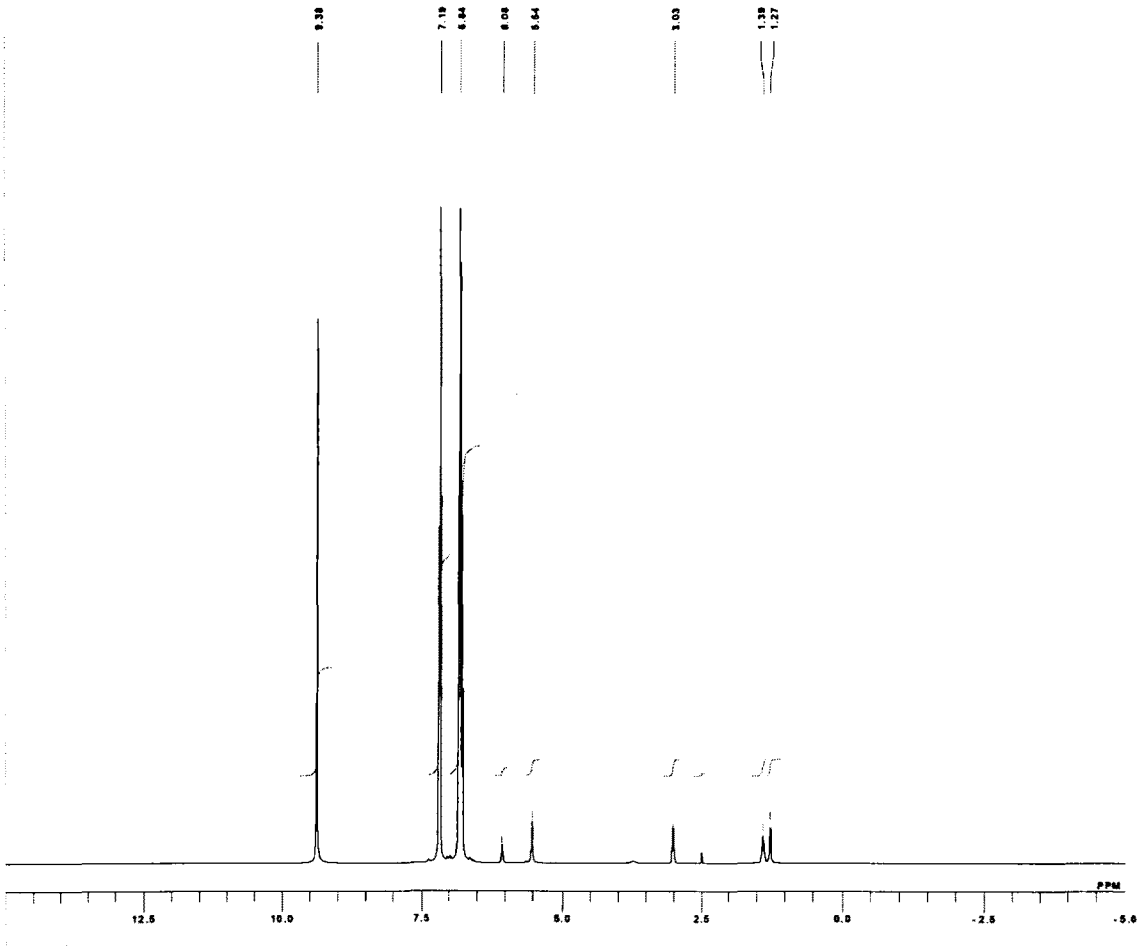


FIG. 24

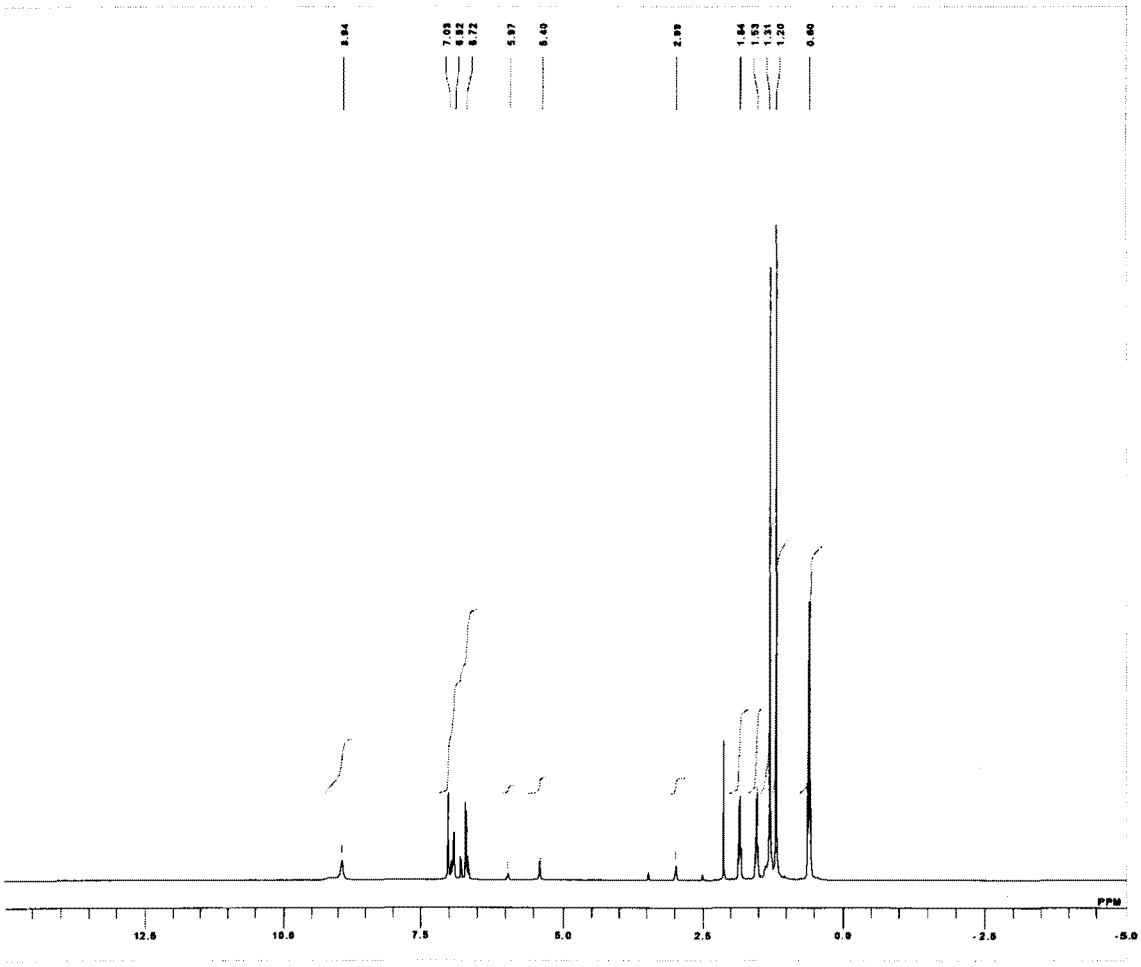

8.84
7.09
6.92
6.72
5.97
5.40
2.99
1.64
1.53
1.51
1.20
0.80
PPM
12.5
10.0
7.5
5.0
2.5
0.0
-2.5
-5.0

FIG. 25

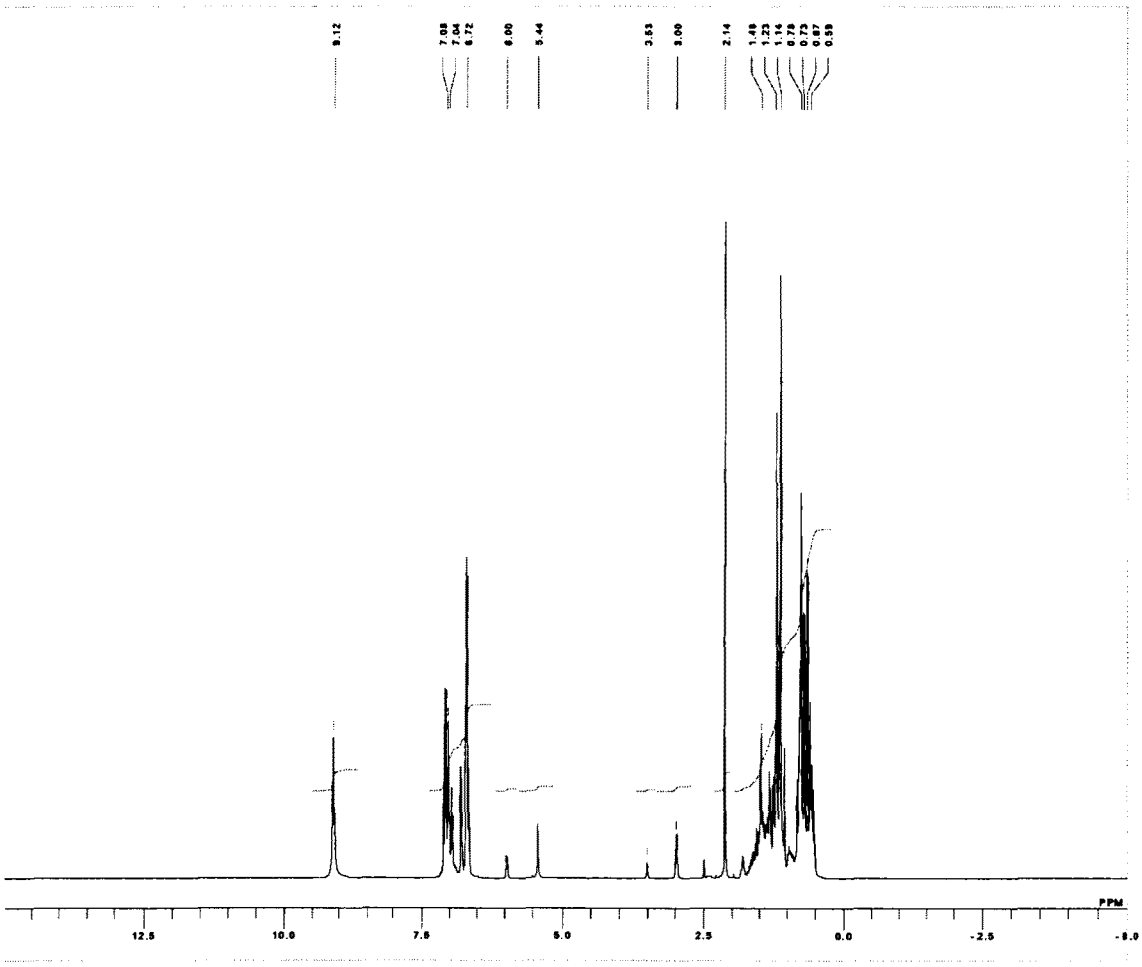
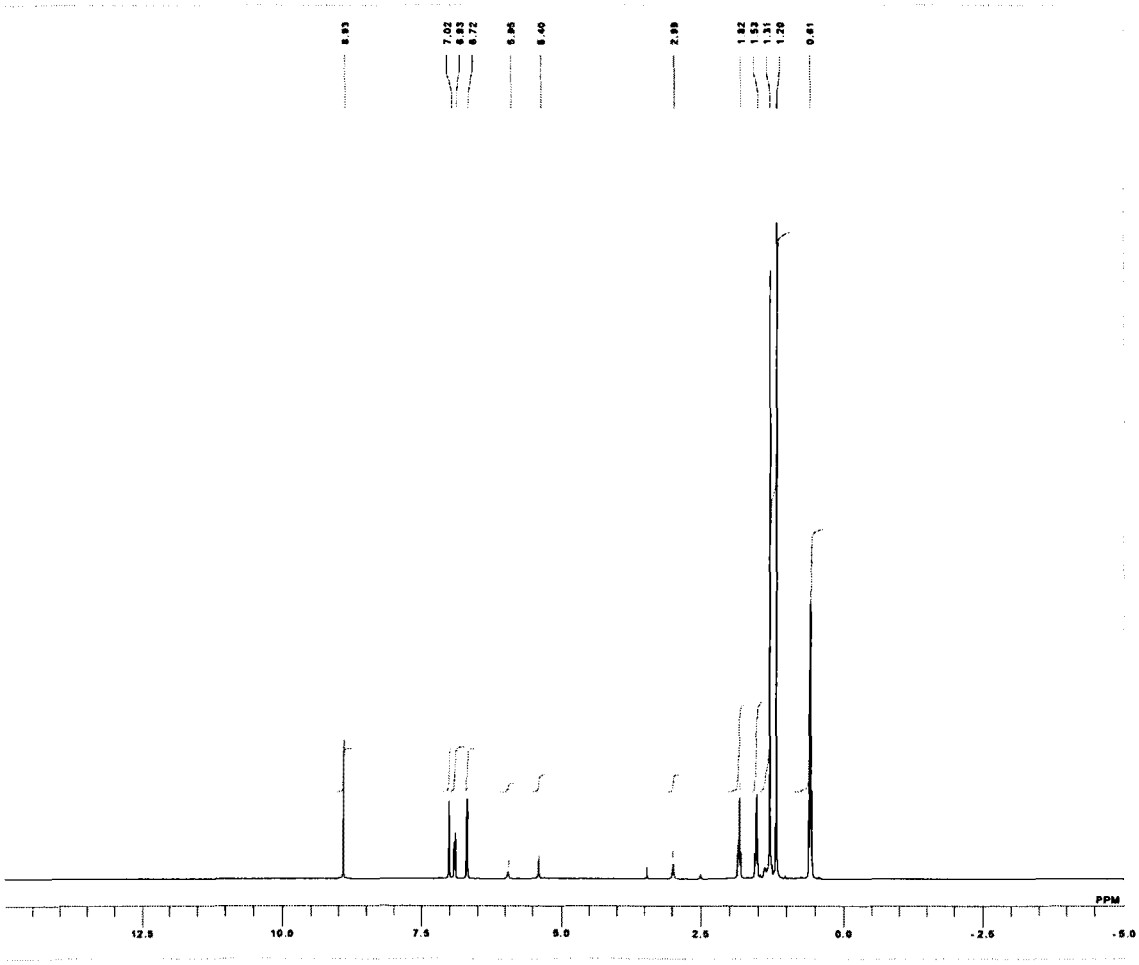

9.12
7.08
7.04
6.72
6.00
5.44
3.53
3.00
2.14
1.48
1.23
1.14
0.78
0.73
0.67
0.55
PPM
12.5
10.0
7.5
5.0
2.5
0.0
-2.5
-5.0

FIG. 26


8.93
7.02
6.83
6.72
5.96
5.40
2.99
1.82
1.53
1.31
1.20
0.61
PPM
12.5
10.0
7.5
5.0
2.5
0.0
-2.5
-5.0