



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

(11) PI0011065-5 B1

(22) Data de Depósito: 05/05/2000
(45) Data da Concessão: 14/12/2010
(RPI 2084)



(51) Int.Cl.:
C08G 18/00

(54) Título: **COMPOSIÇÃO DE POLIOL, E, PROCESSO PARA PREPARAR UMA ESPUMA DE POLIURETANO FLEXÍVEL.**

(30) Prioridade Unionista: 31/05/1999 EP 99110480.3

(73) Titular(es): Huntsman International LLC

(72) Inventor(es): Alain Parfondry, Jianming Yu

“COMPOSIÇÃO DE POLIOL, E, PROCESSO PARA PREPARAR UMA ESPUMA DE POLIURETANO FLEXÍVEL”

A presente invenção refere-se a um processo para a preparação de espumas de baixa densidade. Também se refere a uma composição de 5 poliol específica e a um sistema de reação que são úteis no citado processo.

Para espumas de poliuretano, densidade baixa significa efetividade de custo. Assim, densidade baixa é um objetivo, que entretanto não deve ser alcançado com efeitos prejudiciais sobre as propriedades da espuma. Sabe-se que o sopro físico, usando dióxido de carbono por exemplo, 10 reduz a densidade da espuma, mas está associado com dificuldades de processamento e também com a necessidade de equipamento adicional.

US-P-5.686.502 descreve espumas obtidas por meio de um processo em etapa única a partir de uma mistura reacional compreendendo um poliisocianato orgânico, água, um catalisador e uma mistura de polióis específicos, 15 a qual compreende um primeiro poliol que é um poli(oxialquíleno)triol, que é de cadeia terminada com oxipropileno (OP), um segundo poliol que é um poli(oxialquíleno)poliol, de cadeia terminada com oxietileno (OE) ou OP e um terceiro poliol compreendendo pelo menos um dentre (i) um poli(oxialquíleno)diol terminado com OE e (ii) um poliol polifuncional terminado com OP. As espumas 20 assim obtidas são hidrofílicas. As densidades obtidas nos exemplos variam entre 13 e 20 kg/m³. Não há menção da resiliência.

US-P-5.420.170 descreve espumas que são viscoelásticas as quais são preparadas pela reação de uma composição de poliol específica. A composição de poliol compreende um poliol em bloco de OP/OE possuindo um índice de OH de 14 a 56, 2 a 9% de OE de extremidade e uma funcionalidade de 25 2,3 a 2,8 e um poliol de OP/OE di- ou trifuncional possuindo um índice de OH de 20 a 80 e 60 a 85% de OE (preferivelmente até 20% como OE de extremidade). As espumas resultantes são viscoelásticas e não exibem qualquer ricochete (para densidades obtidas nos exemplos de cerca de 70-77 kg/m³).

US-P-4.833.176 descreve um processo compreendendo a reação de um poliisocianato com um poliol de um índice de NCO abaixo de 70. O poliol pode variar; exemplos compreendem misturas de um poliol de baixo teor de OE e poliol de alto teor de OE.

5 EP-A-0.845.485 descreve um processo para a preparação de espumas flexíveis compreendendo a reação de poliisocianato com um poliol, sendo que o poliol é uma composição de poliol específica. A citada composição de poliol compreende: (i) um poliéster poliol possuindo uma funcionalidade de 2,5-6,0, que é um OP/OE - poliol com 15% ou menos de OE; (ii) um poliéster poliol possuindo uma funcionalidade de 1,8-2,5, que é um poliol todo de OP; (iii) um poliéster poliol possuindo uma funcionalidade de 1,8-6,0 e possuindo um teor de OE de pelo menos 50% em peso. As respectivas quantidades de componentes (i), (ii) e (iii) são as seguintes: (i) 15-70%, (ii) 30-80%, e (iii) 3-15%, baseadas nos pesos combinados de polióis.

15 US-P-5.594.097 descreve um poliol compreendendo OP e OE, possuindo um índice de OH de 16-45, um teor de hidroxila primária de pelo menos 50%, um teor de OE de 21-49%, e possuindo uma estrutura do tipo OP-(OP/OE)-OE, na qual o teor de OE de extremidade é de 10-20%. É citado que este poliol específico é utilizável em combinação com outros polióis. Todos os 20 exemplos, entretanto, referem-se às composições de poliol compreendidas apenas deste poliol específico. Também, embora uma densidade relativamente baixa seja obtida, (i) não há descrição dos valores de resiliência e (ii) há dificuldades de processamento e deformação por compressão ruim quando o poliol enriquecido em OE é utilizado como o poliol principal.

25 Nenhum dos documentos acima ensina ou sugere a presente invenção.

O seguinte modo de descrição é empregado no presente pedido, onde OP representa oxipropileno, enquanto OE representa oxietileno: um poliol de OP-OE é um poliol possuindo primeiro um bloco de OP ligado no iniciador seguido por um bloco de OE. Um OP-OP/OE-poliol é

um poliol possuindo primeiro um bloco de OP e então um bloco de OP e OE aleatoriamente distribuídos. Um OP-OP/OE-OE - poliol é um poliol possuindo primeiro um bloco de OP então um bloco de OP e OE aleatoriamente distribuídos e então um bloco de OE. Um OP-OE - poliol é 5 um poliol possuindo primeiro um bloco de OP e então um bloco de OE. Nas descrições acima apenas uma cauda de um poliol é descrita (vista a partir do iniciador); a funcionalidade hidroxila nominal determinará quantas tais caudas estarão presentes.

A presente invenção proporciona um processo que de modo 10 surpreendente proporciona uma espuma de poliuretano flexível resiliente possuindo uma boa estabilidade (baixa recessão) e as vantagens de poliol enriquecido em OE como o poliol principal (isto é redução de densidade) sem apresentar as desvantagens (isto é impacto negativo sobre as propriedades mecânicas, como resistência à tração, alongamento e resistência ao 15 rasgamento).

A invenção assim proporciona uma composição de poliol compreendendo:

b1) um polioxietileno-polioxipropileno poliol possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6 no qual OE está presente 20 como OE de extremidade, o teor de OE sendo de 10-25% em peso baseado no peso de poliol,

b2) um polioxietileno-polioxipropileno poliol possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6 no qual OE está presente como OE de extremidade e OE aleatório, o teor de OE total estando entre 20- 25 50% em peso e o teor de OE de extremidade estando entre 10-20%, ambos em peso baseados no peso de poliol,

b3) um poliol, possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6, e compreendendo OE e opcionalmente OP sendo que o OE está presente como OE aleatório, o teor de OE sendo de pelo menos

50% em peso baseado no peso de poliol,

estes polióis b1, b2 e b3 estando presentes de acordo com as seguintes proporções, baseadas nos pesos combinados de b1, b2 e b3, b1: 60-97% em peso, b2: 3-40% em peso, b3: 0-25% em
5 peso.

A não ser que seja indicado de outro modo quantidades enunciadas de OE e de OP em um poliol são indicadas daqui por diante como % em peso baseado no peso de poliol.

10 A invenção assim proporciona um processo para a preparação de uma espuma de poliuretano flexível de um índice de NCO de 70-120 e preferivelmente de 70-105 pela reação de:

a) um poliisocianato;

15 b1) um polioxietileno-polioxipropileno poliol possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6 no qual OE está presente como OE de extremidade, o teor de OE sendo de 10-25%,

20 b2) um polioxietileno-polioxipropileno poliol possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6 no qual OE está presente como OE de extremidade e OE aleatório, o teor de OE total estando entre 20-50% em peso, o teor de OE de extremidade estando entre 10-20%,

25 b3) um poliol, possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6, e compreendendo OE e opcionalmente OP sendo que o OE está presente como OE aleatório, o teor de OE sendo de pelo menos 50%,

estes polióis b1, b2 e b3 estando presentes de acordo com as seguintes proporções, baseadas nos pesos combinados de b1, b2 e b3, b1: 60-97% em peso, b2: 3-40% em peso, b3: 0-25% em peso;

c) água; e

d) aditivos e auxiliares per se conhecidos.

No contexto da presente invenção os seguintes termos, se e quando usados, possuem o seguinte significado:

1) índice de isocianato ou índice de NCO:

5 a razão de grupos NCO sobre átomos de hidrogênios reativos a isocianato presentes em uma formulação, dada como uma percentagem:

$$\frac{[\text{NCO}] \times 100}{[\text{hidrogênio ativo}]} \quad (\%)$$

10 Em outras palavras o índice de NCO expressa a percentagem de isocianato realmente usada em uma formulação com relação à quantidade de isocianato teoricamente requerida para reagir com a quantidade de hidrogênio reativo a isocianato empregado em uma formulação.

15 Deve ser observado que o índice de isocianato como aqui empregado é considerado do ponto de vista do real processo de formação de espuma envolvendo o ingrediente isocianato e os 20 ingredientes reativos a isocianato. Quaisquer grupos isocianato consumidos em uma etapa preliminar para produzir poliisocianatos modificados (incluindo tais derivados de isocianato referidos na técnica como pré-polímeros ou quase ou semi-pré-polímeros) ou quaisquer hidrogênios ativos reagidos com isocianato para produzir 25 poliaminas ou polióis modificados, não são considerados no cálculo do índice de isocianato. Apenas grupos isocianato livres e os hidrogênios livres reativos a isocianato (incluindo aqueles da água, se usada) presentes no real estágio de formação de espuma são considerados.

2) A expressão “átomos de hidrogênio reativos a isocianato” como aqui usada para o propósito de cálculo do índice de isocianato refere-se

ao total de átomos de hidrogênio de amina e de hidroxila presentes nas composições reativas na forma de polióis, de poliaminas e/ou de água; isto significa que para o propósito de cálculo do índice de isocianato no real processo de formação de espuma um grupo hidroxila é considerado 5 compreendendo um hidrogênio reativo, um grupo amina primária ou secundária é considerado compreendendo um hidrogênio reativo e uma molécula de água é considerada compreendendo dois hidrogênios ativos.

10 3) Sistema de reação: uma combinação de componentes na qual o componente poliisocianato é mantido em um recipiente separado dos componentes reativos a isocianato.

15 4) A expressão “espuma de poliuretano” como aqui empregada em geral refere-se aos produtos celulares obtidos pela reação de poliisocianatos com compostos contendo hidrogênio reativo a isocianato, usando agentes de formação de espuma, e em particular inclui produtos celulares obtidos com água como o agente de formação de espuma reativo (envolvendo uma reação de água com grupos isocianato dando dióxido de carbono e ligações de uréia e produzindo espumas de poliuretano).

20 5) O termo “funcionalidade hidroxila nominal média” é aqui usado para indicar a funcionalidade média (número de grupos hidroxila por molécula) da composição de poliol assumindo que esta é a funcionalidade média (número de átomos de hidrogênio ativo por molécula) do(s) iniciador(es) usado(s) em sua preparação embora na prática com freqüência seja um pouco menor por causa de alguma insaturação terminal.

25 6) O termo “média” é usado para indicar uma média numérica.

Os poliisocianatos podem ser selecionados de poliisocianatos alifáticos, ciclo-alifáticos e aralifáticos, especialmente diisocianatos, como hexametileno-diisocianato, isoforona-diisocianato, ciclo-hexano-1,4-diisocianato, 4,4'-di-ciclo-hexil-metano-diisocianato e m- e p- tetrametil-xilileno-diisocianato, e em particular de poliisocianatos aromáticos como

tolileno-diisocianatos (TDI), fenileno-diisocianatos e mais preferivelmente difenilmetano diisocianato opcionalmente compreendendo seus homólogos possuindo uma funcionalidade isocianato de 3 ou maior (tais diisocianatos compreendendo tais homólogos são conhecidos como MDI bruto ou MDI polimérico ou misturas de tais MDI bruto ou polimérico com MDI) e suas variantes modificadas.

O difenilmetano diisocianato (MDI) usado pode ser selecionado de 4,4'-MDI, 2,4'-MDI, misturas isoméricas de 4,4'-MDI e 2,4'-MDI e menos do que 10% em peso de 2,2'-MDI, e suas variantes modificadas contendo grupos carbodiimida, uretonimina, isocianurato, uretano, alofanato, uréia e/ou biureto. Preferidos são 4,4'-MDI, misturas isoméricas de 4,4'-MDI e 2,4'-MDI e menos do que 10% em peso de 2,2'-MDI e MDI modificado com uretonimina e/ou com carbodiimida possuindo um teor de NCO de pelo menos 20% em peso e preferivelmente de pelo menos 25% em peso e MDI modificado com uretano obtido pela reação de MDI em excesso e poliol possuindo um peso molecular de no máximo 1.000 e possuindo um teor de NCO de pelo menos 20% em peso e preferivelmente de pelo menos 25% em peso.

Difenilmetano diisocianato compreendendo homólogos possuindo uma funcionalidade isocianato de 3 ou maior são denominados de MDI bruto ou polimérico.

MDI bruto ou polimérico são bem conhecidos na técnica. São preparados pela fosgenação de uma mistura de poliaminas obtidas pela condensação ácida de anilina e formaldeído.

A preparação tanto de misturas de poliamina quanto de misturas de poliisocianato é bem conhecida. A condensação de anilina com formaldeído na presença de ácidos fortes tal como ácido clorídrico dá um produto de reação contendo diamino-difenil-metano junto com polimetileno-polifenileno-poliaminas de funcionalidade superior, a precisa composição

dependendo, dentre outras coisas na maneira conhecida, da razão de anilina/formaldeído. Os poliisocianatos são preparados pela fosgenação de misturas de poliamina e as várias proporções de diaminas, triaminas e poliaminas superiores dão proporções relacionadas de diisocianatos, 5 triisocianatos e poliisocianatos superiores. As proporções relativas de diisocianato, triisocianato e poliisocianatos superiores em tais composições de MDI bruto ou polimérico determinam a funcionalidade média das composições, que é o número médio de grupos isocianato por molécula. Pela variação das proporções de materiais iniciais, a funcionalidade média das 10 composições de poliisocianato pode ser variada de pouco mais de 2 a 3 ou até mesmo mais. Na prática, entretanto, a funcionalidade isocianato média preferivelmente varia de 2,3-2,8. O índice de NCO de tal MDI bruto ou polimérico é pelo menos de 30% em peso. O MDI bruto ou polimérico contém difenilmetano diisocianato, o restante sendo polimetileno- 15 polifenileno-poliisocianatos de funcionalidade maior do que dois junto com subprodutos formados na preparação de tais poliisocianatos por fosgenação de poliaminas. Também podem ser usadas outras variantes modificadas de tal MDI bruto ou polimérico compreendendo grupos carbodiimida, uretonimina, isocianurato, uretano, alofanato, uréia e/ou biureto; são preferidas 20 especialmente aquelas modificadas com uretonimina e/ou carbodiimida e aquelas modificadas com uretano. Misturas de poliisocianatos também podem ser empregadas.

A invenção também se refere a uma composição de poliol, compreendida de polióis b1, b2 e b3.

25 O poliol b1 pode ser preparado por processos conhecidos. Possui uma estrutura do tipo OP-OE, na qual OE está presente como OE de extremidade. O teor de OE é de 10- a 25% em peso.

O poliol b2 também pode ser preparado por processos conhecidos. Pode possuir uma estrutura do tipo OP-OP/OE-OE ou do tipo

OP/OE-OE. O OE está presente como de extremidade e aleatório. O teor de OE total é de 20 a 50% em peso, preferivelmente de 21 a 49%, o teor de OE de extremidade é de 10-20% em peso. No poliol de tipo OP-OP/OE-OE, o primeiro bloco de OP compreende preferivelmente de 20 a 75% em peso das 5 unidades de OP. Preferivelmente a razão em peso de OE de extremidade/OE aleatório é de 1:3 a 3:1. O poliol possuindo a estrutura de tipo OP-OP/OE-OE pode ser notavelmente produzido de acordo com o ensinamento de US 5594097. O poliol possuindo uma estrutura do tipo -OP/OE-OE pode ser notavelmente produzido de acordo com o ensinamento de US 4559366.

10 O poliol b3 é o poliol opcional. Também pode ser preparado por processos conhecidos. Pode possuir uma estrutura do tipo OP/OE ou do tipo -OE (PEG). OE está presente como OE aleatório (se e quanto OP estiver presente). O teor de OE é maior do que 50% em peso. De preferência é um polioxietileno poliol. A funcionalidade destes polióis está compreendida 15 entre 2 e 5, preferivelmente entre 2 e 4.

Para b1 e b2, o peso equivalente está geralmente compreendido entre 1.000 e 4.000, preferivelmente 1.500 e 3.500; enquanto que para b3, o peso equivalente está geralmente compreendido entre 200 e 3.000, preferivelmente 300 e 2.000.

20 A composição de poliol compreende os vários polióis de acordo com as seguintes proporções, expressadas baseando-se nos pesos combinados de polióis:

b1: 60-97%, preferivelmente 65-90%

b2: 3-40%, preferivelmente 10-30%

25 b3: 0-25%, preferivelmente 0-10% (com maior preferência 3-10%); todas as percentagens sendo % em peso.

Cada componente b1, b2 e b3 pode ser compreendido de misturas.

Material dispersado também pode estar presente. Este é

conhecido como poliol modificado por polímero, e compreende por exemplo SAN ou PIPA (Poli Isocianato Poli Adição).

Os polióis modificado por polímeros que são particularmente interessantes de acordo com a invenção são produtos obtidos por 5 polimerização *in situ* de estireno e/ou de acrilonitrila em poli(oxietileno/oxipropileno)polióis e produtos obtidos por reação *in situ* entre um poliisocianato e um composto amino- ou hidróxi-funcional (tal como trietanolamina) em um poli(oxietileno/oxipropileno)poliol. O teor de sólidos (baseado no peso de poliol total b1+b2+b3) pode variar dentro de 10 limites amplos, por exemplo de 5 a 50% em peso. Tamanhos de partículas de polímero dispersado menores do que 50 micrômetros são preferidos. Misturas também podem ser usadas.

Água é empregada como o agente de sopro. Dióxido de carbono pode ser adicionado se desejado. No caso de espumas flexíveis 15 esponjadas por água, elevadamente resilientes, é apropriado o uso de 1,0 a 15 e preferivelmente de 1 a 10% em peso de água baseado no peso de componente poliol total sendo que a água pode ser opcionalmente utilizada conjuntamente com dióxido de carbono.

Outros ingredientes convencionais (aditivos e/ou auxiliares) 20 podem ser usados na preparação de poliuretanos. Estes incluem catalisadores, por exemplo, aminas terciárias e compostos orgânicos de estanho, agentes tensoativos, agentes reticulantes e de prolongamento de cadeia, por exemplo, compostos de baixo peso molecular tais como dióis, trióis (possuindo um peso molecular menor do que aquele de b3) e diaminas, agentes à prova de 25 chama, por exemplo alquil-fosfatos halogenados, cargas e pigmentos. Estabilizantes de espuma, por exemplo copolímeros em bloco de polissiloxano-poli(óxido de alquíleno), podem ser utilizados para estabilizar ou regular as células da espuma.

A quantidade destes ingredientes menores usada dependerá da

natureza do produto requerida e pode ser variada dentro de limites bem conhecidos para um tecnologista de espuma de poliuretano.

A presente invenção também se refere a um processo para a preparação de uma espuma de poliuretano flexível de um índice de NCO de 5 70-120 pela reação de um poliisocianato a); um polioxietileno-polioxipropileno poliol b1); um polioxietileno-polioxipropileno poliol b2); um poliol b3); de acordo com as razões especificadas acima; água c); e aditivos e auxiliares per se conhecidos d).

Estes componentes, notavelmente os polióis b1, b2 e b3 10 podem ser adicionados em qualquer ordem. Notavelmente, os polióis podem ser adicionados de acordo com as seguintes possibilidades não-limitantes:

Parte de b1+b2+b3, então o restante de b1+b2+b3;

Parte de b1+b2 mas não b3; então o restante de b1+b2 e todo b3;

Parte de b1+b3 mas não b2; então o restante de b1+b3 e todo b2;

15 Todo b1, então todo b2+b3; todo b2, então todo b1+b3;

Parte de b1, então o restante de b1 junto com todo b2+b3;

Parte de b2, então o restante de b2 junto com todo b1+b3;

E qualquer outra possibilidade.

No processo da invenção, é para ser notado que processos de 20 pré-polímero ou de quase-pré-polímero, de uma injeção, podem ser portanto empregados o que pode ser apropriado para o tipo particular de poliuretano sendo preparado. Os componentes da mistura reacional formadora de poliuretano podem ser misturados juntos em qualquer maneira conveniente, por exemplo os componentes individuais podem ser pré-misturados de modo 25 a reduzir o número de correntes de componente a serem misturadas na etapa de misturação final. Com freqüência é conveniente que haja um sistema de duas correntes por meio do qual uma corrente compreende um poliisocianato ou pré-polímero isocianato-terminado e a segunda corrente compreende todos os outros componentes da mistura reacional.

As espumas flexíveis podem ser preparadas de acordo com técnicas bem conhecidas na técnica como a técnica de moldagem ou de placa. As espumas podem ser usadas nas indústrias de móveis e de automóveis em assento, acolchoamento e colchões.

5 As espumas flexíveis assim obtidas possuem uma densidade de rinçagem livre compreendida entre 18 e 60 kg/m³. Estas espumas mostram uma resiliência maior do que 45%.

Os seguintes exemplos ilustram a invenção sem limitá-la.

A não ser que sejam indicadas de outro modo, todas as partes
10 são dadas em peso.

Glossário:

(todas as funcionalidades são funcionalidades nominais, pesos equivalentes são pesos equivalentes nominais, todas as % são % em peso e índices de OH são em mg de KOH/g).

15 Poliol A OP-OE, com OE de extremidade. Teor de OE é 15%. Peso equivalente é 2.004. Funcionalidade é 3, índice de OH é 28.

Poliol B OP-OP/OE-OE, teor de OE total é 21%. Teor de OE de extremidade é 15%. Peso equivalente é 2.004. Funcionalidade é 3, índice de OH é 28.

20 Poliol C OP-OP/OE-OE, teor de OE total é 28,6%. Teor de OE de extremidade é 15%. Peso equivalente é 2.004. Funcionalidade é 3, índice de OH é 28.

Poliol D OP/OE-OE, teor de OE total é 26%. Teor de OE de extremidade é 15%. Peso equivalente é 2.158. Funcionalidade é 3, índice de OH é 26.

25 Poliol E OP/OE-OE, teor de OE total é 21%. Teor de OE de extremidade é 15%. Peso equivalente é 1.934. Funcionalidade é 3, índice de OH é 29.

	<u>Poliol F</u>	polioxietileno poliol possuindo um peso equivalente de 450, um índice de OH de 123 e uma funcionalidade 3.
5	<u>Poliol G</u>	polímero poliol, compreendendo 25% de material particulado SAN dispersado em poliol de peso molecular alto, semelhante ao poliol A, mas com um peso equivalente de 1.600 e um índice de OH de 35.
10	<u>Poliol H</u>	OP/OE-OE, teor de OE total é 28%. Peso equivalente é 2.004. Funcionalidade é 3, índice de OH é 28. Teor de hidroxila primária é 85,2.
15	<u>Poliol I</u>	OP-OP/OE-OE, teor de OE total é 28%. Primeiro bloco de OP contém 55% de OP sobre OP e OE total. Teor de OE de extremidade é 15%. Peso equivalente é 2.004. Funcionalidade é 3, índice de OH é 29. Teor de hidroxila primária é 86,7.
20	<u>Isocianato A</u>	MDI compreendendo 93,8% de diisocianato, do qual 48,2% é 2,4'-MDI e 6,2% é espécie oligomérica de funcionalidade superior. Funcionalidade é 2,05.
25	<u>Isocianato B</u>	MDI compreendendo 87,5% de diisocianato, do qual 46,0% é 2,4'-MDI e 12,5% é espécie oligomérica de funcionalidade superior. Funcionalidade é 2,10.
	<u>Isocianato C</u>	Quase-pré-polímero baseado em MDI (81,3% de diisocianato do qual 30% é 2,4'-MDI e 18,7% é espécie oligomérica de funcionalidade superior, funcionalidade é 2,16) e poliol A. Índice de NCO é 29,7.
	<u>Isocianato D</u>	MDI compreendendo 78,2% de diisocianato, do qual 26,0% é 2,4'-MDI e 21,8% é espécie oligomérica de funcionalidade superior. Funcionalidade é 2,19.
	D8154	Catalisador aminado da Air Products
	Niax A1	Catalisador de Union Carbide

D33LV	Catalisador da Air Products
DMEA	Dimetil-etanol-amina
DETDA	Dietil-tolueno-diamina

Espumas são produzidas de acordo com o seguinte esquema.

5 Polióis, catalisadores, agentes tensoativos, água são misturados antes da adição de isocianatos. Misturas de poliol e isocianato são misturados a 20°C durante 8 segundos antes da formação da espuma. Espumas de crescimento livre são preparadas em baldes de plástico de 2,5 l a 10 l. Espumas moldadas são preparadas com um molde quadrado de 9,1 l pré-aquecido para 45°C.

10 As propriedades da espuma são determinadas de acordo com os seguintes métodos e padrões:

FRD (Densidade de crescimento livre);

OAD (Densidade total) (kg/m³), e CD (Densidade do núcleo) (kg/m³): ISO 845

15 Dureza na compressão: CLD 40% (kPa) e perda de histerese (%): ISO 3386-1

Deformação na compressão (espessura): seca 75% e úmida 75% (%): ISO 1856

Dureza na indentação: ILD 40% (N) e perda de histerese (%):

20 ISO 2439

Resiliência (%) Toyota

Resistência ao rasgamento, máx. (N/m): ISO 8067

Resistência à tração (kPa) e alongamento (%): ISO 1798

25 Os resultados são sumariados nas seguintes tabelas. Da última tabela, observar-se-á que os polióis específicos do tipo OP/OE-OE são ainda melhores do que aqueles de tipo OP-OP/OE-OE, visto que proporcionam maior estabilidade de espuma (menor recessão %) e menor densidade de crescimento livre, e são portanto particularmente planejados para a preparação de espumas de densidade menor.

	Exemplos											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Poliol A	75	65	65	75	85	85	65	60	85	75	75	65
Poliol B	20	30	30	20								
Poliol C					10	10	30	35	10	20	20	30
Poliol D												
Poliol E												
Poliol F	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Poliol G												
Água	6,5	6,5	6	6	5	5	6	6	5	6	7	8
B 4113	0,8	0,8	1,2	1,2	0,5	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
D 8154	0,7	0,7	0,6	0,6	0,7	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
Niax A1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
D 33 LV	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3
DMEA					0,5							
DETDA					0,3							
Isocianato A	80	80				75	85					
Isocianato B			80	80				75	85	85	100	
Isocianato C					76							
Índice de NCO	80	80	86	86	85	89	85,6	85,6	96	86,4	80	82,2

	Exemplos											
	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
Poliol A	65	65	65	65	85	85	67	67	55	65	55	55
Poliol B	30	30	30	30					30			
Poliol C					10	10	8	8				
Poliol D										10	20	
Poliol E											20	
Poliol F	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
Poliol G								20	20	15	20	20
Água	6	6	7	7	5	5	4	5	6,6	4	4	4
B 4113	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	0,5	0,5	1,2	0,5	0,5	0,5
D 8154	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,7	0,7	0,6	0,7	0,7
Niax A1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1		
D 33 LV	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3		
DMEA							0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
DETDA							0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3
Isocianato A												
Isocianato B	75	80	80	85	75	80						
Isocianato C												
Índice de NCO	80	86	74	79	96	101	86	86	83,5	86	86	86

Propriedades	Exemplos											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Células	aberta 8	aberta 4	aberta* 0	aberta* 2	aberta 5	aberta 5	aberta 2	aberta 0	aberta* 0	aberta* 0	aberta* 0	aberta* 2
Recessão %	26,7	23,3	22	22,8	33,5	27,7	24,6	23,5	25,5	19,6	21,2	19,6
FRD (kg/cm ³)												
Moldagem												
Densidade total (kg/m ³)												
Densidade do núcleo (kg/m ³)												
Dureza na compressão												
CLD 40% (kPa)												
Histerese (%)												
Deformação na compressão (espessa)												
Seca 75% (%)												
Úmida 75% (%)												
Dureza na indentação												
ILD 40% (N)												
Histerese (%)												
Resiliência (%)												
Resistência ao rasgamento máx. (N/m)												
Resistência à tração (kPa)												
Alongamento (%)												

* linha de borda.

Propriedades	Exemplos										
	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23
Células	aberta*	aberta*	aberta*	aberta*	aberta*	aberta*	aberta*	aberta*	aberta*	aberta*	aberta*
Recessão %	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
FRD (kg/cm ³)											
Moldagem											
Densidade total (kg/m ³)	21,1	20,2	20,2	19,1	22,3	22,3	42,9			44,2	43,9
Densidade do núcleo (kg/m ³)							41			42,4	41,1
Dureza na compressão											
CLD 40% (kPa)	1,4	1,6	1,5	1,6	1,5	1,9	3,7	4,6	2,7	4,6	5,0
Histerese (%)	3,0	31,9	32,4	34,5	26,1	30,4	26,9	40,6	42,9	28,7	28,4
Deforação na compressão (espessa)											
Seca 75% (%)	12,4	11,6	18,9	25,6	7	7,5	10,1			8,7	9,1
Úmida 75% (%)	25,6	36,5	49,9	53	13,3	12,5	12,8			10,6	9,4
Dureza na indentação											
ILD 40% (N)							211,8			255	264
Histerese (%)							28,2			30,9	31,7
Resiliência (%)	51,5	51	50	50	56	53,5	55,4			54,6	54,9
Resistência ao rasgamento máx. (N/m)	205	219	225	248	175	169	190			246	249
Resistência à tração (kPa)	70	81	80	84	78	83	87,2			85	79
Alongamento (%)	135	117	123	115	108	105	90			97	95

* linha de borda.

Exemplos					
	25	26	27	28	29
Poliol A	90	85	80	90	85
Poliol H	10	15	20	10	15
Poliol I					
Água	4,2	4,2	4,2	4,2	4,2
B 4113	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8
Niax A1	0,1	0,1	0,1	0,1	0,1
D 33 LV	0,8	0,8	0,8	0,8	0,8
Isocianato D	60	60	60	60	60
Índice de NCO	89	89	89	89	89
Células	aberta	aberta	aberta	aberta	aberta
Recessão %	22	16	5	27	20
FRD (kg/cm ³)	50,5	43,8	36,3	55,9	47,9
Dureza na compressão					
CLD 40% (kPa)	7,0	6,0	5,1	7,3	6,4
Histerese (%)	33,9	35,7	39,6	34,1	35,0

REIVINDICAÇÕES

1. Composição de poliol, caracterizada pelo fato de compreender:

5 b1) um polioxetileno-polioxipropileno poliol, possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6 no qual OE está presente como OE de extremidade, o teor de OE sendo de 10-25% em peso baseado no peso de poliol;

10 b2) um polioxetileno-polioxipropileno poliol, possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6 no qual OE está presente como OE de extremidade e OE aleatório, o teor de OE total estando entre 20-50% e o teor de OE de extremidade estando entre 10-20%, ambos em peso baseados no peso de poliol;

15 b3) um poliol, possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6, e compreendendo OE e opcionalmente OP sendo que o OE está presente como OE aleatório se OP estiver presente, o teor de OE sendo de pelo menos 50% em peso baseado no peso de poliol,

estes polióis b1, b2 e b3 estando presentes de acordo com as seguintes proporções, baseadas nos pesos combinados de b1, b2 e b3, b1: 60-97% em peso, b2: 3-40% em peso, b3: 0-25% em peso.

20 2. Composição de poliol de acordo com a reivindicação 1, caracterizada pelo fato de compreender os polióis b1, b2 e b3 de acordo com as seguintes proporções: b1: 65-90% em peso, b2: 10-30% em peso, b3: 0-10% em peso.

25 3. Composição de poliol de acordo com a reivindicação 1 ou 2, caracterizada pelo fato de que no polioxetileno-polioxipropileno poliol b2), a razão em peso de OE de extremidade/OE aleatório está entre 1:3-3:1.

4. Composição de poliol de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 3, caracterizada pelo fato de que o poliol b2) é do tipo - OP-OP/OE-OE.

5. Composição de poliol de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 3, caracterizada pelo fato de que o poliol b2) é do tipo - OP/OE-OE.

5 6. Composição de poliol de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 5, caracterizada pelo fato de que a funcionalidade dos polióis b1, b2 e b3 é 2-4.

7. Composição de poliol de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 6, caracterizada pelo fato de que o poliol b3) é um polioxietileno poliol.

10 8. Composição de poliol de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 7, caracterizada pelo fato de compreender partículas dispersadas.

15 9. Composição de poliol de acordo com qualquer uma das reivindicações 1 a 8, caracterizada pelo fato de que o peso equivalente dos polióis b1 e b2) é 1.000-4.000 e do poliol b3) é 200-3.000.

10. Processo para preparar uma espuma de poliuretano flexível em um índice de NCO de 70-120, caracterizado pelo fato de ser por meio da reação de:

a) uma composição de poliisocianato;

20 b1) um polioxietileno-polioxipropileno poliol, possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6 no qual o OE está presente como OE de extremidade, o teor de OE estando entre 10-25% em peso baseado no peso de poliol;

25 b2) um polioxietileno-polioxipropileno poliol possuindo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2-6 no qual o OE está presente como OE de extremidade e OE aleatório, o teor de OE total estando entre 20-50%, o teor de OE de extremidade estando entre 10-20%%, ambos em peso baseados no peso de poliol;

b3) um poliol, possuindo uma funcionalidade hidroxila

nominal média de 2-6, e compreendendo OE e opcionalmente OP sendo que o OE está presente como OE aleatório se OP estiver presente, o teor de OE sendo de pelo menos 50%, em peso baseado no peso de poliol;

5 estes polióis b1, b2 e b3 estando presentes de acordo com as seguintes proporções, baseadas nos pesos combinados de b1, b2 e b3, b1: 60-97% em peso, b2: 3-40% em peso, b3: 0-25% em peso;

- c) água; e
- d) aditivos e auxiliares per se conhecidos.

10 11. Processo de acordo com a reivindicação 10, caracterizado pelo fato de que os polióis b1, b2 e b3 são usados de acordo com as seguintes proporções: b1: 65-90% em peso, b2: 10-30% em peso, b3: 0-10% em peso.

12. Processo de acordo com a reivindicação 10 ou 11, caracterizado pelo fato de que no polioxietileno-polioxipropileno poliol b2), a razão em peso de OE de extremidade/OE aleatório está entre 1:3-3:1.

15 13. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 10 a 12, caracterizado pelo fato de que o poliol b2) é do tipo -OP-OP/OE-OE.

14. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 10 a 13, caracterizado pelo fato de que o poliol b2) é do tipo -OP/OE-OE.

20 15. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 10 a 14, caracterizado pelo fato de que a funcionalidade dos polióis b1, b2 e b3 é 2-4.

16. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 10 a 15, caracterizado pelo fato de que o poliol b3) é um polioxietileno poliol.

25 17. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 10 a 16, caracterizado pelo fato de que o poliol compreende partículas dispersadas.

18. Processo de acordo com qualquer uma das reivindicações 10 a 17, caracterizado pelo fato de que os polióis b1) e b2) possuem um peso

equivalente de 1.000-4.000 e o poliol b3) de 200-3.000 e o poliisocianato é difenilmetano diisocianato opcionalmente compreendendo seus homólogos possuindo uma funcionalidade isocianato de 3 ou maior e suas variantes modificadas.

RESUMO**“COMPOSIÇÃO DE POLIOL, E, PROCESSO PARA PREPARAR UMA ESPUMA DE POLIURETANO FLEXÍVEL”.**

A invenção se refere a uma composição de poliol 5 compreendendo b1) um polioxieteno-polioxipropileno poliol, tendo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2 a 6, no qual o OE está presente como OE de extremidade, o teor de OE sendo de 10 a 25%, em peso, baseado no peso de poliol; b2) um polioxieteno-polioxipropileno poliol, tendo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2 a 6, no qual o OE está presente 10 como OE de extremidade e OE aleatório, o teor de OE total estando entre 20 a 50%, e o teor de OE de extremidade estando entre 10 a 20%, ambos em peso, baseados no peso de poliol; b3) um poliol, tendo uma funcionalidade hidroxila nominal média de 2 a 6, e compreendendo OE, e, opcionalmente, 15 OP, sendo que o OE está presente como OE aleatório se o OP estiver presente, o teor de OE sendo de pelo menos 50%, em peso, baseado no peso de poliol, estes polióis b1, b2 e b3 estando presentes de acordo com as seguintes proporções, baseadas nos pesos combinados de b1, b2 e b3:b1 = 60 a 97% em peso, b2 = 3 a 40% em peso, e b3 = 0 a 25% em peso. A presente 20 invenção também se refere a um processo para preparar uma espuma de poliuretano flexível a um índice de NCO de 70 a 120.