



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

(21) PI 0808536-6 A2



(22) Data de Depósito: 29/02/2008
(43) Data da Publicação: 26/08/2014
(RPI 2277)

(51) Int.Cl.:

C08G 18/12
C08G 18/30
C08G 18/38
C08G 18/76
C09J 175/04

(54) Título: COMPOSIÇÕES DE TIOURETANO E
PROCESSOS PARA FABRICAÇÃO E USO DO
MESMO

(57) Resumo:

(30) Prioridade Unionista: 01/03/2007 US 11/680,842

(73) Titular(es): Chevron Phillips Chemical Company LP

(72) Inventor(es): Chad W. Brawn, Jim D. Byers, Michell D.
Refvik

(74) Procurador(es): Orlando de Souza

(86) Pedido Internacional: PCT US2008055455 de
29/02/2008

(87) Publicação Internacional: WO 2008/106637 de
04/09/2008

COMPOSIÇÕES DE TIOURETANO E PROCESSOS PARA FABRICAÇÃO E USO
DO MESMO

ESCOPO DA INVENÇÃO

A invenção relaciona-se a composições de tiouretano
5 geralmente feitas a partir de uma reação de composições de
éster de tiol e um isocianato. A invenção também se
relaciona aos processos para preparação de tais composições
e usos para as composições.

DESCRIÇÃO DA TECNOLOGIA RELACIONADA

10 A indústria química esforça-se para fabricar produtos,
como pré-polímeros, adesivos, selantes, fertilizantes,
revestimentos, espumas, e combustíveis, com matérias primas
mais baratas e que estejam em fornecimento abundante. Como
os combustíveis fósseis lentamente diminuem com o passar do
15 tempo, fontes alternativas estão sendo procuradas como
substituições para os combustíveis. Adicionalmente, a
indústria química continuamente se esforça para produzir
produtos e usar matérias primas que são ecologicamente
corretas para reduzir os riscos potenciais relacionados à
20 segurança e problemas ambientais.

SUMÁRIO DA INVENÇÃO

A presente invenção fornece uma composição de pré-
polímero que é produzida por reação de uma composição de
éster de tiol com uma composição de isocianato. Nas
25 personificações, a composição de éster de tiol pode ser uma
composição de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma
composição de éster de tiol de ligação cruzada;
alternativamente, uma composição de éster insaturado
mercaptanizado; alternativamente, uma composição de éster
30 epoxidizado mercaptanizado; ou alternativamente, uma

composição de éster insaturado mercaptanizado de ligação cruzada. As composições de isocianato aqui descritas podem ser usadas para preparar a composição do polímero. Em um aspecto, a composição do pré-polímero pode incluir um
5 agente modificador da propriedade. Um solvente também pode ser usado na produção da composição do pré-polímero.

A composição do pré-polímero pode ser curada para produzir uma composição de polímero que possui propriedades úteis em tais aplicações como selantes e adesivos. A
10 curagem pode ocorrer pela exposição da composição do pré-polímero à umidade. Outros meios adequados de curagem também podem ser usados.

Além das composições de pré-polímeros e polímeros, métodos de fabricação das composições também são fornecidos
15 como personificações da presente invenção. Em uma personificação, a composição de éster de tiol entra em contato com a composição de isocianato para formar uma composição de pré-polímero. A composição do pré-polímero é então curada para produzir o polímero. Em algumas
20 personificações, um catalisador é usado para produzir a composição do pré-polímero. Em outro aspecto, um agente modificador de propriedade é usado para produzir a composição do pré-polímero.

A composição do pré-polímero pode ser usada em
25 aplicações de curagem úmida de parte única. Em outro aspecto, a composição do pré-polímero pode ser usada em sistemas de curagem multi-componentes. Em sistemas de curagem multi-componentes, a composição de pré-polímero de tiouretano contendo isocianato não reagido e em excesso, é
30 mantida separada de outros componentes reativos do

isocianato para prevenir que o isocianato reaja com os outros componentes. Quando o sistema de curagem de multi-componentes está em uso, os componentes são misturados juntos por um curto período de tempo para serem aplicados aos componentes ou aplicados separadamente e misturados logo em seguida pelo contato um com o outro. Quando os componentes são misturados antes da aplicação, um misturador estático ou similar pode ser usado. O catalisador nos sistemas de curagem de multi-componentes pode ser um segundo catalisador separado ou um catalisador residual, que foi usado na formação da composição do pré-polímero de tiouretano. Outros componentes adequados para uso em sistemas de curagem de multi-componentes, como preenchedores, serão aparentes àqueles habilitados na tecnologia e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção. Uma vez que os componentes são aplicados, são então curados para produzir uma composição de polímero de tiouretano. Em uma personificação, o sistema de curagem de multi-componentes pode usar um poliol e opcionalmente um catalisador para curar a composição de pré-polímero.

DESCRIÇÃO DETALHADA DA INVENÇÃO

Nesta especificação, "natural" refere-se a materiais obtidos, por qualquer método, de frutos, nozes, vegetais, plantas e animais comuns na natureza. Como um exemplo, um óleo de fonte natural refere-se a óleos extraídos, e opcionalmente purificados, de frutos, nozes, vegetais, plantas e animais comuns na natureza. Adicionalmente, um óleo insaturado de fonte natural refere-se a óleos extraídos de fontes insaturadas, e opcionalmente

purificados, de frutos, nozes, vegetais, plantas e animais comuns na natureza. Como outro exemplo, o óleo de fonte natural insaturada pode ser derivado de nozes, vegetais, plantas e animais geneticamente modificados. Como ainda
5 outro exemplo, o óleo de fonte natural insaturada compreende um triglicerídeo derivado de nozes, vegetais, plantas e animais geneticamente modificados.

Nesta especificação, "material prima de fonte natural" refere-se a materiais obtidos por extração, quebra química, ou processamento químico de materiais "naturais". Um
10 exemplo não-limitante inclui óleos de fontes naturais que podem ser extraídos de frutos, nozes, vegetais, plantas e animais comuns na natureza. Como outro exemplo não-limitante, glicerol e ácidos carboxílicos ou ésteres de
15 ácidos carboxílicos, saturados ou insaturados, podem ser produzidos e isolados pelo processamento químico de triglicerídeos extraídos de frutos, nozes, vegetais, plantas e animais comuns na natureza.

Nesta especificação, "sintético" refere-se a materiais produzidos a partir de blocos de construção química não
20 derivados diretamente de fontes naturais. Por exemplo, o óleo de éster insaturado sintético pode ser produzido pela reação de etileno glicol sintético e um ácido carboxílico sintético, p.ex., ácido acrílico ou ácido propiônico.
25 Outros tipos de materiais sintéticos serão aparentes àqueles habilitados na tecnologia e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção.

Sem levar em conta as definições de natural e sintético, os materiais aqui descritos podem ser produzidos
30 a partir de uma combinação de materiais naturais e

sintéticos, que podem ser referidos como "semi-sintéticos". Como um exemplo não-limitante, os óleos de ésteres insaturados descritos nesta especificação podem ser obtidos ou produzidos a partir de uma combinação de matérias primas de fontes naturais e sintéticas. Por exemplo, o óleo de éster insaturado pode ser produzido pela reação de etileno glicol sintético e ácido oléico isolado de uma fonte de óleo natural. Alternativamente, o óleo de éster insaturado pode ser produzido a partir da reação do glicerol isolado de óleos de fontes naturais e um ácido carboxílico sintético, p.ex., ácido acrílico. Alternativamente, o óleo de éster insaturado pode ser produzido a partir do glicerol e ácido oléico isolados de óleos de fontes naturais.

Nesta especificação, "composição de éster de tiol" refere-se a uma composição de éster que inclui "moléculas de éster de tiol". A molécula de éster de tiol possui pelo menos um grupo tiol e pelo menos um grupo éster dentro da molécula de éster de tiol.

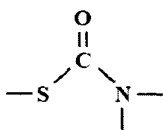
Nesta especificação, "composição de éster de hidroxí tiol" refere-se a uma composição de éster que inclui "moléculas de éster de hidroxí tiol". A molécula de éster de hidroxí tiol possui pelo menos um grupo tiol, pelo menos um grupo éster, e pelo menos um grupo hidroxí ou álcool dentro da molécula de éster de hidroxí tiol. Alternativamente, o grupo álcool e o grupo tiol podem ser combinados no mesmo grupo, que pode ser referido como um "grupo α -hidroxí tiol".

Nesta especificação, "composição de éster insaturado" refere-se a uma composição de éster que inclui moléculas de éster insaturadas. As moléculas de éster insaturadas

possuem pelo menos um grupo éster e pelo menos uma dupla ligação carbono-carbono dentro da molécula de éster insaturado.

5 Nesta especificação, "composição de éster insaturado epoxidizado" refere-se a uma composição de éster que foi produzida por epoxidização da composição de éster insaturado.

10 Nesta especificação, "tiouretano" refere-se a uma composição de uretano que inclui moléculas que possuem pelo menos uma da seguinte estrutura:

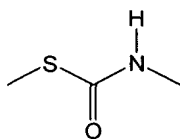


15 A presença do grupo tiouretano pode ser determinada por métodos conhecidos dos habilitados na tecnologia, como espectroscopia infravermelha, espectroscopia de Raman, ^{13}C NMR, e similares.

COMPOSIÇÕES DE PRÉ-POLÍMEROS DE TIOURETANO

20 Em um aspecto, a composição de pré-polímero da presente invenção pode ser descrita como um produto da reação de uma composição de éster tiol, uma composição de isocianato, e um catalisador. Em personificações, a composição do pré-polímero pode ser chamada de composição de pré-polímero tiouretano. A composição de pré-polímero de tiouretano pode ser curada. Uma vez que a composição de pré-polímero de tiouretano tenha sido curada, a composição pode então ser chamada de composição de polímero de tiouretano. Geralmente, a composição do pré-polímero de tiouretano da presente invenção compreende moléculas de
30 pré-polímero de tiouretano que possuem múltiplos grupos de

tiouretano possuindo a estrutura G2:

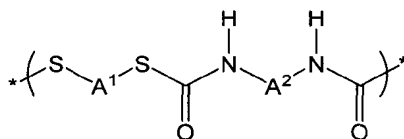


5

G2

onde as valências não designadas representam o restante da estrutura das moléculas do pré-polímero, incluindo grupos adicionais possuindo a estrutura G2. A presença do grupo tiouretano G2 pode ser determinada por métodos conhecidos dos habilitados na tecnologia, como espectroscopia infravermelha, espectroscopia de Raman, ^{13}C NMR, e similares.

A composição do pré-polímero de tiouretano da presente invenção pode ser descrita como compreendendo as moléculas de pré-polímero de tiouretano que possuem múltiplas unidades D2:



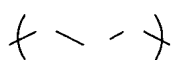
20

D2

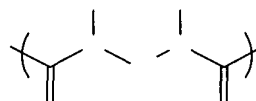
onde as valências não designadas representam o restante da estrutura das moléculas do pré-polímero de tiouretano, incluindo unidades repetidas adicionais possuindo a estrutura D2. Em personificações, a estrutura das moléculas de pré-polímero de tiouretano que possuem unidades D2 repetidas é linear; ou, alternativamente, a estrutura das moléculas de pré-polímero de tiouretano possuindo unidades repetidas D2 possui ligação cruzada. Quando a estrutura das moléculas de pré-polímero de tiouretano que possuem unidades D2 repetidas é de ligação

30

cruzada, A1 e/ou A2 ainda compreendem unidades repetidas D2 adicionais. A unidade repetida D2 da molécula do pré-polímero de tiouretano é formada por duas unidades diferentes: U1 e U2.



U1



U2

5

Geralmente, a unidade U1 da molécula de pré-polímero de tiouretano é derivada de um éster de tiol da composição de éster de tiol e a unidade U2 da molécula de pré-polímero de tiouretano é derivada de um isocianato da composição de isocianato. Desta forma, A1 representa o restante da molécula de éster tiol (incluindo grupos éster, quaisquer outros grupos presentes na molécula de éster de tiol, e opcionalmente unidades repetidas D2), e A2 representa o restante da molécula de isocianato (incluindo quaisquer outros grupos presentes na molécula de isocianato e opcionalmente unidades repetidas D2 adicionais). Quando o pré-polímero de tiouretano é de ligação cruzada, U1 (via A1), U2 (via A2) ou ambos podem conter grupos tiouretano adicionais. Devido às unidades U1 e U2 serem derivadas de dois materiais diferentes, as estruturas destas unidades são independentes uma da outra. Portanto, as moléculas de pré-polímero de tiouretano que possuem unidades repetidas D2 podem ser compostas de qualquer combinação das unidades U1 e U2. Assim, as moléculas de pré-polímero de tiouretano que possuem a unidade repetida D2 podem ser descritas como o produto de reação de uma composição de éster de tiol, uma

composição de isocianato, e um catalisador, onde a unidade U1 pode ser derivada de qualquer éster de tiol aqui descrito e a unidade U2 pode ser derivada de qualquer isocianato aqui descrito.

5 A composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como um produto da reação de uma composição de éster tiol, uma composição de isocianato, e um catalisador. A composição de éster de tiol, isocianato e catalisador são elementos independentes do pré-polímero de tiouretano.

10 Portanto, a composição do pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como um produto da composição do pré-polímero de tiouretano de qualquer combinação das composições de éster tiol, composições de isocianato, e os catalisadores aqui descritos. Em aspectos, a composição do pré-polímero

15 de tiouretano pode compreender moléculas de pré-polímero de tiouretano linear. Em outros aspectos, a composição do pré-polímero de tiouretano pode compreender moléculas de pré-polímero de tiouretano de ligação cruzada. Quando a composição do pré-polímero de tiouretano compreende

20 moléculas de pré-polímero de tiouretano de ligação cruzada, ou a composição de éster tiol compreende moléculas de éster possuindo mais do que 2 grupos de tiol por molécula de éster de tiol ou a composição de isocianato compreende moléculas de isocianato possuindo mais de 2 grupos de

25 isocianato por molécula de isocianato. Alternativamente, quando a composição do pré-polímero de tiouretano compreende moléculas de pré-polímero de tiouretano de ligação cruzada, ou a composição de éster tiol compreende moléculas de éster possuindo mais do que 2 grupos de tiol

30 por molécula de éster de tiol e a composição de isocianato

compreende moléculas de isocianato possuindo mais de 2 grupos de isocianato por molécula de isocianato.

Geralmente, a composição do éster de tiol compreende moléculas de éster de tiol que possuem pelo menos 2 grupos tiol e a composição de isocianato compreende moléculas de isocianato que possuem pelo menos 2 grupos de isocianato. Personificações adicionais com relação ao número ou número médio de grupos tiol presentes nas moléculas de éster de tiol da composição de éster de tiol estão aqui descritas e são geralmente aplicáveis à descrição da composição do pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster tiol, uma composição de isocianato, e um catalisador. Personificações adicionais com relação ao número ou número médio de grupos isocianato presentes nas moléculas de isocianato da composição de isocianato estão aqui descritas e são geralmente aplicáveis à descrição da composição do pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster tiol, uma composição de isocianato, e um catalisador.

Nas personificações, a composição de éster de tiol utilizada para produzir a composição do pré-polímero de tiouretano pode compreender um éster de hidroxí tiol; alternativamente, um éster de tiol de ligação cruzada; alternativamente, um éster insaturado mercaptanizado; alternativamente, um éster epoxidizado mercaptanizado; ou alternativamente, um éster insaturado mercaptanizado de ligação cruzada. Em personificações não-limitantes, a composição de éster de tiol pode compreender um óleo de fonte natural mercaptanizada; alternativamente, um óleo de fonte natural epoxidizada mercaptanizada; ou

alternativamente, um óleo de fonte natural epoxidizada mercaptanizada de ligação cruzada. Em outras personificações não-limitantes, a composição do éster de tiol compreende óleo de soja mercaptanizado; 5 alternativamente, um óleo de rícino mercaptanizado; alternativamente, um óleo de soja epoxidizado mercaptanizado; ou, alternativamente, um óleo de soja mercaptanizado de ligação cruzada. Outros esters de tiol são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas 10 composições de éster de tiol para descrever a composição do pré-polímero de tiouretano que é um produto de reação de uma composição de éster de tiol, uma composição de isocianato, e um catalisador. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de éster de tiol (p.ex., número 15 médio de grupos tiol por molécula de éster de tiol, conteúdo de enxofre no tiol, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever mais os ésteres de tiol das composições de éster de tiol. Além das composições de éster de tiol aqui descritas, outras composições adequadas 20 de éster de tiol serão aparentes àqueles habilitados na tecnologia, podendo ser usados, e sendo considerados dentro do escopo da presente invenção.

Geralmente, a composição de isocianato pode compreender, sozinha ou em combinação, qualquer isocianato 25 aqui descrito. Em personificações, a composição de isocianato pode compreender isocianatos alifáticos, isocianatos cicloalifáticos, isocianatos aromáticos, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de isocianato pode compreender um isocianato alifático; 30 alternativamente, um isocianato cicloalifático; ou

alternativamente, uma composição de isocianato aromático. Isocianatos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas composições de isocianato descrevendo a
5 composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol, e uma composição de isocianato. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de
10 isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato.

Geralmente, o catalisador pode compreender, sozinho ou em combinação, qualquer catalisador aqui descrito. Em algumas personificações, o catalisador pode ser um
15 catalisador de estanho, um catalisador de amina, um catalisador de bismuto, um catalisador de ferro, ou suas combinações. Em personificações, o catalisador pode ser selecionado a partir do grupo consistindo de uma amina terciária, um composto de estanho orgânico, um propileno glicol iniciado por amina, e suas combinações. Em algumas
20 personificações, o catalisador pode ser uma amina. Em outras personificações, o catalisador pode ser um composto de estanho. Em algumas personificações, o catalisador é uma amina terciária. Em outras personificações, o
25 catalisador pode ser uma amina alifática; ou alternativamente, uma amina aromática. Em outras personificações, o catalisador pode ser uma amina poliéter; alternativamente, uma amina polialqueno; ou alternativamente, um poliol de amina terciária. Em ainda
30 outras personificações, o catalisador de amina pode ser uma

poliamina compreendendo pelo menos dois grupos amina. Em algumas personificações com catalisadores de amina, o catalisador pode ser 1,8-diazabicyclo[5,4,0]undec-7-eno [DBU-CAS# 6674-22-2]; alternativamente, 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octano [DABCO-CAS# 280-57-9]); ou alternativamente, trietilamina. Em uma personificação com catalisador de composto de estanho, o composto de estanho pode ser dibutil estanho dilaurato. Outros tipos de catalisadores adequados serão aparentes àqueles habilitados na tecnologia e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção.

Geralmente, a composição de éster de tiol, a composição de isocianato, e o catalisador são elementos independentes da composição de pré-polímero de tiouretano descrita como o produto de reação de uma composição de éster de tiol, uma composição de isocianato, e um catalisador. Portanto, a composição do pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como um produto de reação de qualquer uma combinação de éster tiol, composições de isocianato, e os catalisadores aqui descritos. Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador e uma composição de éster de tiol com uma composição de isocianato compreendendo um isocianato que possui pelo menos dois grupos isocianatos. Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um

isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano
5 pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo
10 pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser
15 utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol, e uma composição de isocianato. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou
20 número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol,
25 uma composição de isocianato, e um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de hidroxí tiol, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato
30 alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um

isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano
5 pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de hidroxí tiol, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo
10 pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser
15 utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de hidroxí tiol, e uma composição de isocianato. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato
20 (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma
25 composição de éster de hidroxí tiol, uma composição de isocianato, e um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol de ligação
30 cruzada, e uma composição de isocianato compreendendo um

isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas
5 misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol de ligação cruzada, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos
10 dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo
15 menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol de ligação cruzada, e uma composição de
20 isocianato. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da
25 composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol de ligação cruzada, uma composição de isocianato, e um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um
30 catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo

um éster insaturado mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, 5 um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um éster 10 insaturado mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo 15 menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como 20 um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um éster insaturado mercaptanizado, e uma composição de isocianato. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por 25 molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol compreendendo um éster 30 insaturado mercaptanizado, uma composição de isocianato, e

um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo
5 um éster epoxidizado mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos
10 isocianato, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um éster epoxidizado mercaptanizado, e uma composição de isocianato
15 compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos,
20 cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de
25 éster de tiol compreendendo um éster epoxidizado mercaptanizado, e uma composição de isocianato. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem
30 ser utilizados para descrever melhor a composição de

isocianato utilizada na descrição da composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol compreendendo um éster epoxidizado mercaptanizado, uma composição de isocianato, e
5 um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um éster insaturado mercaptanizado de ligação cruzada, e
10 uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas
15 personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um éster insaturado mercaptanizado de ligação cruzada, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato
20 alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e
25 aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol
30 compreendendo um éster insaturado mercaptanizado de ligação

cruzada, e uma composição de isocianato. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol compreendendo um éster insaturado mercaptanizado de ligação cruzada, uma composição de isocianato, e um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas composições de isocianato

descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural mercaptanizado, e uma composição de isocianato.

5 Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da composição de pré-
10 polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural mercaptanizado, uma composição de isocianato, e um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de
15 tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural epoxidizado mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um
20 isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um
25 catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural epoxidizado mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo
30 pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um

isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser
5 utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural epoxidizado mercaptanizado, e uma composição de isocianato.
10 Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da composição de pré-
15 polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural epoxidizado mercaptanizado, uma composição de isocianato, e um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de
20 tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural mercaptanizado de ligação cruzada, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um
25 isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um
30 catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo

um óleo de fonte natural mercaptanizado de ligação cruzada, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo
5 pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser
10 utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural mercaptanizado de ligação cruzada, e uma composição de isocianato.
15 Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da composição de pré-
20 polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de fonte natural mercaptanizado de ligação cruzada, uma composição de isocianato, e um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de
25 tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de soja mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato
30 cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato,

um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma
5 composição de éster de tiol compreendendo um óleo de soja mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato;
10 ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas composições de isocianato
15 descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de soja mercaptanizado, e uma composição de isocianato. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou
20 número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol
25 compreendendo um óleo de soja mercaptanizado, uma composição de isocianato, e um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo
30 um óleo de rínico mercaptanizado, e uma composição de

isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de rícino mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de rícino mercaptanizado, e uma composição de isocianato. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de rícino mercaptanizado, uma composição de isocianato, e um catalisador.

Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de soja epoxidizado mercaptanizado, e uma
5 composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas
10 personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de soja epoxidizado mercaptanizado, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato
15 alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e
20 aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol
25 compreendendo um óleo de soja epoxidizado mercaptanizado, e uma composição de isocianato. Adicionalmente, outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados
30 para descrever melhor a composição de isocianato utilizada

na descrição da composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de soja epoxidizado mercaptanizado, uma composição de isocianato, e um catalisador.

5 Em personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de soja mercaptanizado de ligação cruzada, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato

10 alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato, ou suas misturas. Em algumas personificações, a composição de pré-polímero de tiouretano

15 pode ser descrita como o produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de soja mercaptanizado de ligação cruzada, e uma composição de isocianato compreendendo um isocianato alifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato;

20 alternativamente, um isocianato cicloalifático possuindo pelo menos dois grupos isocianato; ou alternativamente, um isocianato aromático possuindo pelo menos dois grupos isocianato. Isocianatos alifáticos, cicloalifáticos e aromáticos particulares possuindo pelo menos dois grupos de

25 isocianatos são aqui descritos e podem geralmente ser utilizados nas composições de isocianato descrevendo a composição do pré-polímero de tiouretano como um produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de soja mercaptanizado de ligação

30 cruzada, e uma composição de isocianato. Adicionalmente,

outros aspectos dos materiais de isocianato (p.ex., número ou número médio de grupos isocianato por molécula de isocianato, etc.) são aqui descritos e podem ser utilizados para descrever melhor a composição de isocianato utilizada na descrição da composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação de uma composição de éster de tiol compreendendo um óleo de soja mercaptanizado de ligação cruzada, uma composição de isocianato, e um catalisador.

Em personificações, os pré-polímeros de tiouretano da presente invenção podem ser descritos como um produto produzido por qualquer processo aqui descrito capaz de produzir a composição do pré-polímero de tiouretano e ainda ser descrito como sendo produzido utilizando quaisquer personificações dos processos aqui descritos.

Em personificações, a composição do pré-polímero de tiouretano da presente invenção pode ser ainda descrita por suas propriedades. Em algumas personificações, a composição do pré-polímero de tiouretano descrita como o produto da reação da composição de éster de tiol, uma composição de isocianato, e um catalisador possui uma viscosidade aparente variando de 2500 centipoises (cP) a 10.000 cP a uma temperatura de 120°F (49°C). Em outras personificações, a composição do pré-polímero de tiouretano da presente invenção possui uma viscosidade aparente variando de 3.000 cP a 9.000 cP a 120°F (49°C); alternativamente, variando de 3.500 cP a 8.000 cP a 120°F (49°C); alternativamente, variando de 4.000 cP a 7.000 cP a 120°F (49°C); ou alternativamente, variando de 4.500 cP a 6.000 cP a 120°F (49°C). As viscosidades aparentes podem ser medidas usando-se um viscosímetro de Brookfield®.

As propriedades da composição do pré-polímero de tiouretano podem ser ajustadas adicionando-se outros componentes à composição. Por exemplo, um solvente pode ser adicionado à composição do pré-polímero de tiouretano durante a síntese ou após a mesma. O solvente pode ser útil no ajuste da viscosidade da composição do pré-polímero de tiouretano. Alguns solventes podem diminuir a viscosidade da composição do pré-polímero de tiouretano para permitir que a composição seja aplicada com mais facilidade.

Em uma personificação, o solvente pode ser um solvente de hidrocarbono, um solvente de hidrocarbono halogenado, um solvente de cetona, um solvente de carbonato, um solvente de éter, ou quaisquer combinações dos mesmos. Em uma personificação, o solvente pode ser um solvente de hidrocarbono; alternativamente, um solvente de hidrocarbono halogenado; alternativamente, um solvente de cetona; alternativamente, um solvente de carbonato; ou alternativamente, um solvente de éter.

Em uma personificação, o solvente pode compreender, ou alternativamente consistir essencialmente de, um hidrocarbono saturado C4 a C20; alternativamente, um hidrocarbono saturado C4 a C10. Em uma personificação, o solvente pode compreender, ou alternativamente consistir essencialmente de, um hidrocarbono aromático C6 a C20; ou alternativamente, um hidrocarbono aromático C6 a C20. Em uma personificação, o solvente pode compreender, ou alternativamente consistir essencialmente de, um hidrocarbono halogenado C1 a C15; alternativamente, um hidrocarbono halogenado C1 a C10; ou alternativamente, um

hidrocarbono halogenado C1 a C5. Em algumas personificações, o solvente pode compreender, ou alternativamente consistir essencialmente de, uma cetona C1 a C10; ou alternativamente, uma cetona C1 a C5. Em algumas

5 personificações, o solvente pode compreender, ou alternativamente consistir essencialmente de, um carbonato C1 a C10; ou alternativamente, um carbonato C1 a C5. Em algumas personificações, o solvente pode compreender, ou alternativamente consistir essencialmente de, um éster C1 a

10 C10; ou alternativamente, um éster C1 a C10. Em algumas personificações, o solvente pode compreender, ou alternativamente consistir essencialmente de, um éter C1 a C10; ou alternativamente, um éter C1 a C10.

Solventes de hidrocarbono saturado adequados que podem

15 ser utilizados, sozinhos ou em qualquer combinação, incluem, mas não se limitam, pentano, n-hexano, hexanos, ciclopentano, ciclohexano, n-heptano, heptanos, n-octano, e destilado de petróleo. Solventes de hidrocarbono aromático adequados que podem ser utilizados, sozinhos ou em qualquer

20 combinação, incluem, mas não se limitam, benzeno, tolueno, misturas de xilenos, orto-xileno, meta-xileno, para-xileno, e etilbenzeno. Solventes de hidrocarbono halogenados adequados que podem ser utilizados, sozinhos ou em qualquer

25 combinação, incluem, mas não se limitam, tetracloreto de carbono, clorofórmio, cloreto de metileno, dicloroetano, tricloroetano, clorobenzeno, e diclorobenzeno. Solventes de cetona adequados que podem ser utilizados, sozinhos ou em qualquer

30 combinação, incluem, mas não se limitam, acetona, e metil etil cetona. Solventes de carbonato adequados que podem ser utilizados, sozinhos ou em qualquer

combinação, incluem, mas não se limitam, dimetil carbonato, dietil carbonato, propileno carbonato, e glicerol carbonato. Solventes de ésteres adequados que podem ser utilizados, sozinhos ou em qualquer combinação, incluem, 5 mas não se limitam, metil acetato, etil acetato, e butil acetato. Solventes de éter saturado adequados que podem ser utilizados, sozinhos ou em qualquer combinação, incluem, mas não se limitam, dimetil éter, dietil éter, metil etil éter, diéteres de glicóis (p.ex., dimetil glicol 10 éter), furanos, dihidrofurano, dihidrofuranos substituídos, tetrahidrofurano (THF), tetrahidropiranos, 1,3-dioxanos, e 1,4-dioxanos. Em algumas personificações, o solvente pode ser metil etil cetona, carbonato de glicerol, acetona, hexano, destilado de petróleo, butil acetato, tolueno, 15 benzeno, ou suas combinações. Outros solventes adequados serão aparentes àqueles habilitados na tecnologia e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção.

Em outro exemplo, as propriedades da composição de pré-polímero de tiouretano podem ser modificadas incluindo-se 20 se um agente modificador de propriedade dentro de uma das composições usadas para produzir a composição de pré-polímero de tiouretano ou uma composição separada usada para fazer o pré-polímero de tiouretano. Consequentemente, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser 25 descrita como um produto da reação de uma composição de éster tiol, uma composição de isocianato, um catalisador, e uma composição de agente modificador de propriedade. Agentes modificantes de propriedades aplicáveis são aqui descritos e podem ser usados sem limitação para descrever a 30 composição de pré-polímero de tiouretano como produto de

reação. Em uma personificação, o agente modificador de propriedade pode ser um composto que possui um grupo hidrogênio ativo. Grupos de hidrogênio ativo aplicáveis que podem estar presentes nas propriedades dos agentes modificadores de propriedades são aqui descritos e podem ser usados sem limitação para descrever a composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação. Adicionalmente, compostos específicos contendo grupos de hidrogênio ativo são aqui descritos e podem ser usados sem limitação para descrever a composição de pré-polímero de tiouretano como produto de reação.

As composições de pré-polímero de tiouretano aqui descritas podem ser armazenadas por períodos longos de tempo antes de serem usados em sistemas de curagem sem efeitos adversos substanciais relacionados às suas propriedades, p.ex., as propriedades permanecem substancialmente sem mudanças durante o tempo de vida em prateleira. Em um aspecto, as composições de pré-polímero de tiouretano podem ter uma vida em prateleira de pelo menos seis meses.

A composição de pré-polímero de tiouretano pode ser usada em numerosas aplicações. Como exemplo, a composição do pré-polímero de tiouretano pode ser usada em sistemas de curagem úmida de parte única. Em tais sistemas de parte única, a umidade é tipicamente usada para curar a composição de pré-polímero de tiouretano por um período de tempo que pode variar de 2 horas até 24 horas. Se uma curagem mais rápida for desejada, calor pode ser usado para apressar a curagem. Outros perfis adequados para curagem podem ser usados, uma vez que serão aparentes aos

habilitados na tecnologia.

Como outro exemplo, a composição do pré-polímero pode ser usada em sistemas de curagem multi-componentes. Sistemas de curagem multi-componentes tipicamente
5 compreendem compostos adicionais que podem reagir com isocianato em excesso na composição de pré-polímero de tiouretano. Em um exemplo, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser usada em um sistema de curagem multi-componentes compreendendo a composição de pré-polímero de
10 tiouretano, um agente com hidrogênio ativo, e opcionalmente um segundo catalisador para curar a composição de pré-polímero de tiouretano. Qualquer um dos agente de hidrogênio ativo aqui descritos podem ser usados na produção da composição de pré-polímero de tiouretano
15 curada. Por exemplo, em algumas personificações, o agente de hidrogênio ativo é um poliol, como óleo de rícino. Em sistemas de curagem multi-componentes, a composição de pré-polímero de tiouretano contendo isocianato não reagido e em excesso, é mantida separada de outros componentes com
20 hidrogênio ativo para prevenir que o isocianato reaja com os outros componentes com hidrogênio ativo. Em algumas personificações, o segundo catalisador pode ser um catalisador residual permanecendo na composição de pré-polímero de tiouretano. Em outras personificações, um
25 catalisador diferente pode ser usado. O tipo de catalisador e a localização do catalisador em relação aos componentes pode ser selecionado com base no resultado desejado. Por exemplo, alguns catalisadores são bons para catalisar água, então o catalisador pode estar localizado
30 em qualquer um dos componentes. Outros catalisadores são

melhores para catalisar álcoois. Outros componentes adequados para uso em sistemas de curagem de multi-componentes, como preenchedores, serão aparentes àqueles habilitados na tecnologia e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção. Uma vez que os componentes são aplicados, são então curados para produzir uma composição de polímero de tiouretano.

Quando o sistema de curagem de multi-componentes está em uso, os componentes são misturados juntos por um curto período de tempo para serem aplicados aos componentes ou aplicados separadamente e misturados logo em seguida pelo contato um com o outro. Quando os componentes são misturados antes da aplicação, um misturador estático ou similar pode ser usado.

Além dos sistemas de curagem úmida aqui descritos, outros usos ou aplicações adequadas para a composição de pré-polímero de tiouretano serão aparentes para os habilitados na tecnologia e são consideradas dentro do escopo da presente invenção.

COMPOSIÇÕES DE POLÍMEROS DE TIOURETANO

As composições de pré-polímero de tiouretano aqui descritas podem ser usadas para produzir composições de polímero de tiouretano. As composições de pré-polímero de tiouretano podem ser curadas para produzir composições de polímero de tiouretano. Os componentes que foram usados para produzir e descrever a composição de pré-polímero de tiouretano também podem ser usados para produzir e descrever a composição de polímero de tiouretano. Minimamente, as composições de polímero de tiouretano compreendem moléculas de polímeros compreendendo múltiplos

grupos de tiouretano possuindo a estrutura G2 descrita previamente. A composição do polímero de tiouretano da presente invenção também pode ser descrita como compreendendo moléculas de tiouretano possuindo múltiplas unidades D2 previamente descritas compostas das unidades U1 e U2 previamente descritas. Devido à composição do tiouretano é produzida a partir da composição de pré-polímero de tiouretano, a composição do polímero de tiouretano pode ser ainda descrita usando os aspectos do pré-polímero de tiouretano aqui descrito. Dependendo do polímero de tiouretano em particular produzido a partir da composição de pré-polímero de tiouretano, as moléculas do polímero de tiouretano podem não possuir mais grupos tiouretano do que as moléculas do pré-polímero de tiouretano. Por exemplo, a curagem úmida de uma composição de pré-polímero de tiouretano não adiciona substancialmente nenhum grupo tiouretano adicional ao polímero. Porém, se um sistema multi-componente utiliza um composto tiol como agente de hidrogênio ativo, então grupos adicionais de tiouretano podem ser formados.

Em personificações, a composição do pré-polímero de tiouretano da presente invenção pode ser ainda descrita por suas propriedades. Por exemplo, em algumas personificações, a composição de polímero de tiouretano possui uma força total de curagem num substrato carvalho-carvalho por ASTM D1002 na variação de 300 psi (2068 kPa) a 1500 psi (10340kPa); alternativamente, de 350 psi (2413 kPa) a 1400 psi (9653 kPa); alternativamente, de 400 psi (2758 kPa) a 1300 psi (8963 kPa); alternativamente, de 450 psi (3103 kPa) a 1200 psi (8274 kPa); alternativamente, de

500 psi (3447 kPa) a 1100 psi (7584 kPa); alternativamente, de 550 psi (3792 kPa) a 1000 psi (6895 kPa); alternativamente, de 600 psi (4137 kPa) a 900 psi (6205 kPa); ou alternativamente, de 650 psi (4482 kPa) a 800 psi (5516 kPa). Os valores de curagem completos são mostrados como força de curagem completa antes da exposição às condições atmosféricas. A força também pode ser mostrada como a força após a exposição à atmosfera de acordo com os métodos descritos em ASTM D 1151-84. Geralmente, a força diminui com a exposição à atmosfera. Em uma personificação, a exposição à atmosfera resulta em uma redução de menos de 50% da força; alternativamente, menos de 40 por cento da redução da força; alternativamente, menos de 35 por cento de redução na força; alternativamente, menos de 30 por cento de redução na força; ou alternativamente, menos de 25 por cento de redução na força.

Outras propriedades também podem ser usadas para descrever a composição do polímero de tiouretano da presente invenção. Em algumas personificações, a composição do polímero de tiouretano possui um valor de alongamento que varia de 40% a 110%; alternativamente, de 50% a 100%; alternativamente, de 60% a 90%; ou alternativamente, de 70% a 80%. O alongamento foi medido de acordo com ASTM D412. Em um aspecto, a composição de polímero de tiouretano possui uma rigidez média A variando de 25 A a 60 A; alternativamente, de 30 A a 50 A; alternativamente, de 35 A a 40 A. A rigidez A foi medida de acordo com ASTM D2240. Como outro exemplo, a composição de polímero de tiouretano possui um módulo médio a 25% de

alongamento variando de 350 psi (2413 kPa) a 1175 psi (8101 kPa); alternativamente, de 400 psi (2758 kPa) a 1100 psi (7584 kPa); alternativamente, de 500 psi (3447 kPa) a 1000 psi (6895 kPa); alternativamente, de 600 psi (4137 kPa) a 900 psi (6205 kPa); ou alternativamente, de 700 psi (4826 kPa) a 800 psi (5516 kPa). Em outro aspecto, a composição de polímero de tiouretano possui um módulo médio a 50% de alongamento variando de 250 psi (1724 kPa) a 850 psi (5861 kPa); alternativamente, de 300 psi (2068 kPa) a 800 psi (5516 kPa); alternativamente, de 400 psi (2758 kPa) a 700 psi (4826 kPa); ou alternativamente, de 500 psi (3447 kPa) a 600 psi (4137 kPa). Em ainda outro exemplo, a composição de polímero de tiouretano possui uma força tênsil média variando de 200 psi (1379 kPa) a 700 psi (4826 kPa); alternativamente, de 300 psi (2068 kPa) a 600 psi (4137 kPa); ou alternativamente, 400 psi (2758 kPa) a 500 psi (3447 kPa). O módulo tênsil foi medido de acordo com ASTM D412. Em outro aspecto, acredita-se que a composição de polímero de tiouretano possua um resultado de teste de mobilidade articular que varia e -45% a +45%; ou alternativamente, de -25% a +25%.

As propriedades da composição do polímero de tiouretano podem ser ajustadas adicionando-se outros componentes, como um agente modificador de propriedade, quando a composição de pré-polímero de tiouretano está sendo preparada. O agente modificador da propriedade pode ser adicionado para modificar várias propriedades dentro da composição do pré-polímero de tiouretano e da composição do polímero de tiouretano. Por exemplo, os materiais podem ser adicionados para melhorar a flexibilidade da composição do

polímero de tiouretano. Em uma personificação, o agente modificador de propriedade pode ser um composto que possui um grupo hidrogênio ativo. Grupos de hidrogênio ativo aplicáveis que podem estar presentes nas propriedades dos agentes modificadores de propriedades são aqui descritos e podem ser usados sem limitação com relação à composição de pré-polímero de tiouretano e/ou composição de polímero de tiouretano. Adicionalmente, compostos específicos contendo grupos de hidrogênio ativo são aqui descritos e podem ser usados sem limitação para descrever a composição de pré-polímero de tiouretano e polímero de tiouretano. Por exemplo, em uma personificação, um poliol pode ser adicionado como o agente modificador de propriedade à composição de pré-polímero de tiouretano quando estiver sendo preparada. Em algumas personificações, o poliol pode ser um polipropileno glicol. Reagentes oligoméricos podem ser usados em personificações onde a flexibilidade é necessária, como quando a composição de polímero de tiouretano está sendo usada como um adesivo ou selante. Em algumas personificações, o reagente oligomérico pode ser um poliol oligomérico, poliéter, poliéster, poliaminas, ésteres de poliéter, e suas combinações. O agente modificador de propriedade pode ser usado para fornecer outras propriedades, como força e adesão aos polímeros produzidos de acordo com as personificações da presente invenção. Em um aspecto, o agente modificador de propriedade inclui um grupo hidrogênio ativo. Agentes modificadores de propriedade adequados podem incluir oligômeros trifuncionais, resinas, polibutadieno, poliéter aminas (como polímeros de Jeffamine®), éteres, uréia,

di(hidroxietil)disulfeto (DIHEDS), e similares. O agente modificador de propriedade pode ser adicionado durante a síntese do pré-polímero de tiouretano ou adicionado imediatamente antes ou durante a curagem do polímero de tiouretano em um sistema multi-componente. Se o agente modificador de propriedade contém um grupo hidrogênio ativo e é adicionado durante a síntese, acredita-se que a composição do pré-polímero resultando terá propriedades levemente diferentes do que se o agente modificador de propriedade contendo um grupo hidrogênio ativo for adicionado em seguida.

Em um aspecto, o agente modificador de propriedade oligomérica, sem relação com o tipo, pode ter um Mn que varia entre 1000 e 10.000; alternativamente, entre 1100 e 9.000; alternativamente, entre 1200 e 8.000; alternativamente, entre 1300 e 7.000; alternativamente, entre 1400 e 6.000; alternativamente, entre 1500 e 5.000; alternativamente, entre 1600 e 4.000; alternativamente, entre 1700 e 3.000; ou alternativamente, entre 1800 e 2.000. Outros agentes modificadores de propriedade adequados serão aparentes para os habilitados na tecnologia e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção.

PROCESSO DE FABRICAÇÃO DAS COMPOSIÇÕES DE POLÍMEROS DE

TIOURETANO

Em uma personificação da presente invenção, o método de produção da composição de polímero de tiouretano compreende contactar a composição do éster tiol, a composição de isocianato, e o catalisador para produzir uma composição de pré-polímero de tiouretano e curar a

composição de pré-polímero de tiouretano para produzir o polímero de tiouretano. Qualquer composição de éster de tiol, composição de isocianato, e catalisador aqui descritos, podem ser usados para produzir as composições de

5 pré-polímero de tiouretano da presente invenção. As composições de pré-polímero de tiouretano podem ser curadas para produzir composições de polímero de tiouretano. Em algumas personificações, a curagem ocorre por exposição da composição do pré-polímero de tiouretano à umidade.

10 Em um aspecto, um método de fabricar a composição de polímero de tiouretano da presente invenção compreende contactar a composição de pré-polímero de tiouretano, um agente de hidrogênio ativo, e opcionalmente, um segundo catalisador. Em uma personificação, a curagem ocorre na

15 presença do agente de hidrogênio ativo compreendendo pelo menos dois grupos de hidrogênio ativo selecionados do grupo consistindo em um grupo álcool, um grupo tiol, um grupo de ácido carboxílico, um grupo amina, e um grupo amida. Em algumas personificações, o agente de hidrogênio ativo

20 compreende pelo menos dois grupos de hidrogênio ativo selecionados do grupo consistindo em um grupo álcool, um grupo tiol, e um grupo amina; ou alternativamente selecionado do grupo consistindo em um grupo álcool e um grupo tiol. Em algumas personificações, o agente de

25 hidrogênio ativo compreende um poliol; alternativamente, um politiol; ou alternativamente, um ácido policarboxílico. Em algumas personificações, o agente de hidrogênio ativo é umidade (p.ex., água). Em uma personificação onde o agente de hidrogênio ativo é úmido, a umidade pode ser umidade

30 atmosférica. Como previamente descrito, o método de

produção da composição de polímero de tiouretano pode ser usada em sistemas de curagem multi-componentes. Por exemplo, o agente de hidrogênio ativo e opcionalmente o segundo catalisador podem ser armazenados separadamente da
5 composição de pré-polímero de tiouretano que contém excesso de grupos reativos de isocianato. A composição de pré-polímero de tiouretano pode ser aplicada separadamente ou juntamente com o agente de hidrogênio ativo e o segundo catalisador ótimo para produzir a composição do polímero de
10 tiouretano, uma vez que os componentes curem. O segundo catalisador pode ser qualquer catalisador aqui descrito. O segundo catalisador pode ser o mesmo catalisador usador para produzir a composição de pré-polímero de tiouretano. O segundo catalisador pode ser um catalisador residual da
15 reação que produziu a composição de pré-polímero de tiouretano, ou pode ser adicionado independentemente da produção da composição de pré-polímero de tiouretano.

A ordem na qual os componentes usados para produzir a composição de pré-polímero de tiouretano são misturados ou
20 adicionados não afeta significativamente as propriedades da composição de pré-polímero de tiouretano resultante, nem a composição de polímero de tiouretano ultimamente produzida. Por exemplo, em algumas personificações, os componentes são simultaneamente adicionados a um reator. Em outras
25 personificações, os componentes são alimentados individualmente em qualquer ordem.

A composição de polímero de tiouretano pode ser produzida por formação e posterior curagem de uma composição de pré-polímero de tiouretano. A composição de
30 pré-polímero de tiouretano pode ser qualquer composição de

pré-polímero de tiouretano aqui descrita. Alternativamente, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser qualquer composição de pré-polímero de tiouretano aqui descrita como produto de reação. Por exemplo, a composição de pré-polímero de tiouretano pode ser descrita como qualquer produto de reação de um catalisador, uma composição de éster de tiol, e uma composição de isocianato aqui descritas; ou alternativamente, como qualquer produto de reação de uma composição de éster de tiol, uma composição de isocianato, um catalisador, e uma composição de agente modificador de propriedade aqui descritos. Uma vez que o catalisador, a composição de éster de tiol, a composição de isocianato, e opcionalmente o agente modificador de propriedade (ou composição de agente modificador de propriedade) são elementos independentes da composição de pré-polímero de tiouretano utilizada para produzir o polímero de tiouretano, a composição de pré-polímero de tiouretano descrita como produto de reação de um catalisador, composição de éster de tiol, composição de isocianato, e opcionalmente o agente modificador de propriedade (ou composição de agente modificador de propriedade) pode ser descrita usando qualquer catalisador aqui descrito, qualquer composição de éster de tiol aqui descrita, qualquer composição de isocianato aqui descrita, e opcionalmente qualquer agente modificador de propriedade (ou composição de agente modificador de propriedade) aqui descrito.

Geralmente, a composição do éster de tiol e a composição do isocianato podem ser combinadas em qualquer

grupo funcional de taxa equivalente que possa produzir uma composição de pré-polímero de tiouretano. A taxa equivalente do grupo funcional relaciona-se à taxa do número de grupos funcionais na composição do éster de tiol

5 capaz de reagir com um grupo isocianato da composição de isocianato para formar um grupo tiouretano para o número de grupos de isocianato na composição de isocianato. A taxa equivalente do grupo funcional é fornecida pelo termo "índice de isocianato" ou "taxa equivalente NCO:XH", onde

10 NCO representa os equivalentes dos grupos isocianato usados para produzir a composição de pré-polímero de tiouretano e XH representa os equivalentes dos grupos hidrogênio ativos usados para produzir a composição de pré-polímero de tiouretano. Os grupos de hidrogênio ativo podem incluir

15 grupos de tiol, grupos de álcool, grupos de amina, grupos de amida, grupos de ácido carboxílico, e suas combinações. Em uma personificação, os grupos de hidrogênio ativo podem incluir grupos de álcool, grupos de tiol, e grupos de amina; ou alternativamente, podem incluir grupos de álcool

20 e grupos de tiol; alternativamente, compreendem grupos de tiol; alternativamente, consistindo de grupos de álcool e grupos de tiol; ou alternativamente, consistem essencialmente de grupos de tiol. Outros tipos de grupos de hidrogênio ativo adequados serão aparentes àqueles

25 habilitados na tecnologia e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção. Em uma personificação, o XH da taxa de equivalência NCO:XH usada para preparar o pré-polímero de tiouretano consiste essencialmente em grupos de tiol e grupos de álcool. Em uma personificação,

30 o XH da taxa de equivalência NCO:XH usada para preparar o

pré-polímero de tiouretano consiste essencialmente em grupos de tiol. Em um aspecto, substancialmente todos os grupos de hidrogênio ativo são recobertos por grupos isocianatos. Os habilitados na tecnologia ainda
5 reconhecerão qual composição do éster de tiol compreende apenas grupos de tiol e qual composição de éster de tiol compreende grupos de tiol e grupos de álcool. Em algumas personificações, substancialmente todo o XH da taxa de equivalência NCO:XH usada para preparar o pré-polímero de
10 tiouretano vem da composição de éster de tiol. Em outras personificações, uma porção de XH na taxa de equivalência NCO:XH usada para preparar o pré-polímero de tiouretano pode vir de um agente adicionado (p.ex., um agente modificador de propriedade como um poliol ou qualquer outro
15 composto possuindo um grupo de hidrogênio ativo aqui descrito). Quando uma porção dos grupos de hidrogênio ativo vem de compostos além do éster de tiol, a porção dos grupos de hidrogênio ativo que vem dos compostos além do éster de tiol é designada como YH e pode representar
20 qualquer grupo de hidrogênio ativo, ou qualquer combinação de grupos de hidrogênio ativo, aqui descrita. Em algumas personificações, YH representa um grupo de álcool. Em personificações, a taxa equivalente do grupo functional (NCO:XH) pode ser pelo menos 2,1. Em algumas
25 personificações, a taxa equivalente NCO:XH pode variar de 2,1 a 10,1; alternativamente, de 2,1 a 6,0; ou alternativamente, de 2,1 a 4,0. Em algumas personificações, a taxa equivalente NCO:XH pode variar de 2,5 a 3,5. Em algumas personificações onde o pré-polímero
30 de tiouretano é produzido com um agente modificador de

propriedade, o agente modificador de propriedade pode ser adicionado em uma quantidade para atingir uma taxa molar particular YH:SH enquanto mantém uma taxa NCO:XH que possui qualquer valor aqui revelado. Em algumas personificações, a taxa molar YH:SH pode variar de 0,01:1 a 5:1; alternativamente, varia de 0,05:1 a 3:1; alternativamente, varia de 0,1:1 para 2:1; ou alternativamente, varia de 0,15:1 para 1,6:1.

Em um aspecto, o método de fabricação da composição do polímero de tiouretano ainda compreende curar a composição do pré-polímero de tiouretano usando umidade. Calor também podem ser usado para curar a composição do pré-polímero de tiouretano da presente invenção. Outros tipos de perfis de curagem adequados serão aparentes àqueles habilitados na tecnologia e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção.

Em personificações, o catalisador usado para produzir a composição do pré-polímero de tiouretano pode ser selecionado a partir do grupo consistindo de uma amina terciária, um composto de estanho orgânico, um propileno glicol iniciado por amina, e suas combinações. Em algumas personificações, o catalisador pode ser uma amina. Em outras personificações, o catalisador pode ser um composto de estanho. Em algumas personificações, o catalisador é uma amina terciária. Em outras personificações, o catalisador pode ser uma amina alifática; ou alternativamente, uma amina aromática. Em outras personificações, o catalisador pode ser uma amina poliéter; alternativamente, uma amina polialqueno; ou alternativamente, um poliol de amina terciária. Em ainda

outras personificações, o catalisador de amina pode ser uma poliamina compreendendo pelo menos dois grupos amina. Em algumas personificações com catalisadores de amina, o catalisador pode ser 1,8-diazabicyclo[5,4,0]undec-7-eno [DBU-CAS# 6674-22-2]; alternativamente, 1,4-diazabicyclo[2.2.2]octano [DABCO-CAS# 280-57-9]); ou alternativamente, trietilamina. Em uma personificação com catalisador de composto de estanho, o composto de estanho pode ser dibutil estanho dilaurato. Qualquer um destes catalisadores pode ser usado como segundo catalisador para produzir a composição do polímero de tiouretano, como nos sistemas de curagem de multi-componentes.

Geralmente, o catalisador é utilizado quando a composição do pré-polímero de tiouretano compreendendo a composição do éster de tiol e o isocianato não cura sob as condições desejadas. Em personificações, o catalisador pode compreender menos de 10 por cento do peso da composição do pré-polímero de tiouretano. Em outras personificações, o catalisador compreende de 0,01% a 9,0% em peso da composição do pré-polímero de tiouretano; alternativamente, de 0,1% a 7,0% em peso da composição do pré-polímero de tiouretano; ou alternativamente, de 0,5% a 3,0% em peso da composição do pré-polímero de tiouretano. Os processos aqui descritos podem ser usados para produzir qualquer uma das composições de polímero de tiouretano aqui descritas. A ordem das etapas dos processos pode variar como aqui descrito.

MATÉRIAS PRIMAS

COMPOSIÇÃO DO ÉSTER DE TIOL

A composição do éster de tiol usada como matéria prima

para produzir os polímeros aqui descritos pode ser descrita usando um número de métodos diferentes. Funcionalmente, o éster de tiol pode ser descrito pelo tipo de grupos funcionais presentes no éster de tiol. Nesta descrição

5 functional, a composição de éster de tiol minimamente contém moléculas possuindo pelo menos um grupo éster e pelo menos um grupo tiol. Em outras personificações, a composição de éster de tiol pode incluir ésteres de tiol com e sem grupos adicionais, como grupos hidroxí, e/ou

10 ligações -Sx- de polisulfetos onde x é um integrante maior do que 1. Quando o éster de tiol contém o grupo hidroxí, o éster de tiol é referido como um éster de hidroxí tiol. Quando o éster de tiol possui ligações do polisulfeto -Sx-, onde x é um integrante maior do que 1, o éster de tiol pode

15 ser referido como éster de tiol de ligação cruzada. Quando o éster de tiol possui um grupo hidroxí e um grupo polisulfeto -Sx-, onde x é um integrante maior do que 1, o éster de tiol pode ser referido como éster de hidroxí tiol de ligação cruzada.

20 Alternativamente, o éster de tiol pode ser descrito usando um nome que indique o método pelo qual foi formado. Por exemplo, um éster de tiol referido como éster insaturado mercaptanizado refere-se a um éster de tiol produzido pela reação de sulfeto de hidrogênio com um éster

25 insaturado. O éster insaturado mercaptanizado pode ser ainda descrito utilizando os descritores funcionais dos ésteres de tiol presentes no éster insaturado mercaptanizado. Por exemplo, em dois exemplos não-limitantes, um óleo de soja mercaptanizado pode ser ainda

30 descrito por uma combinação do número de grupos éster e o

número de grupos tiol entre outros aspectos do éster de tiol presente no óleo de soja mercaptanizado, enquanto um óleo de rícino mercaptanizado pode ser ainda descrito pela combinação do número de grupos éster, o número de grupos tiol, o número de grupos hidroxil, entre outros aspectos do éster tiol presente no óleo de rícino mercaptanizado.

Em um aspecto, a composição do éster de tiol da presente invenção pode ser produzida por reação de qualquer éster insaturado com sulfeto de hidrogênio, com descrito na Patente dos EUA de N°s de Aplicação de série 11/060,675; 11/060,696; 11/059,792; e 11/059,647 (daqui para frente as "675 Aplicações"), cuja revelação está incorporada por referência em sua totalidade. Quando a composição de éster de tiol é produzida por reação de um éster insaturado com sulfeto de hidrogênio, o material produzido pode ser referido como éster insaturado mercaptanizado. Devido aos ésteres insaturados poderem conter múltiplas ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado, a reatividade da ligação dupla carbono-carbono e probabilidade estatística ditam que cada molécula de éster de tiol da composição do éster de tiol da matéria prima produzida a partir da composição de éster insaturado não terá o mesmo número de grupos de tiol, número de ligações duplas não-reagidas carbono-carbono, número de sulfetos cíclicos, taxa molar de ligações duplas carbono-carbono para grupos de tiol, taxa molar de sulfetos cíclicos para grupos de tiol, e/ou outras quantidades de grupos funcionais e taxas molares aqui reveladas como o éster insaturado. Adicionalmente, os ésteres insaturados também podem compreender uma mistura de ésteres insaturados

individuais possuindo um número diferente de ligações duplas carbono-carbono e/ou grupos éster. Assim, muitas destas propriedades serão descritas como um número médio dos grupos por molécula de éster de tiol dentro da
5 composição de éster de tiol ou taxa média por molécula de éster de tiol dentro da composição de éster de tiol. Em outras personificações, deseja-se controlar o conteúdo de enxofre no tiol presente no éster de tiol. Por ser difícil assegurar que o sulfeto de hidrogênio reaja com cada
10 ligação dupla carbono-carbono dentro do éster insaturado, certas moléculas de éster de tiol podem ter mais ou menos grupos tiol do que outras moléculas. Assim, a porcentagem do peso dos grupos tiol é marcada como uma média de todas as moléculas do éster de tiol da composição de éster de
15 tiol.

Quando o éster de tiol é de ligação cruzada, o éster de tiol é referido como éster de tiol de ligação cruzada ou um éster de hidroxí tiol de ligação cruzada, dependendo das composições usadas para produzir o éster de tiol de ligação
20 cruzada. Cada um destes tipos de composições de éster de tiol está descrito aqui. Ésteres de hidroxí tiol, ésteres de hidroxí tiol de ligação cruzada, ésteres insaturados mercaptanizados, ésteres epoxidizados mercaptanizados, ésteres insaturados mercaptanizados de ligação cruzada, e
25 ésteres epoxidizados mercaptanizados de ligação cruzada são todos considerados como composições de éster de tiol. Muitos dos mesmos atributos que são usados para descrever as composições de éster de tiol, como taxas molares e outros elementos descritivos independentes aqui descritos,
30 são igualmente aplicáveis a muitos dos diferentes tipos de

composições de éster de tiol aqui descritas.

Geralmente, as composições do éster de tiol podem ser descritas como comprometendo um ou mais grupos funcionais separados ou discretos da molécula de éster de tiol e/ou
5 composição de éster de tiol. Ester grupos funcionais independentes podem incluir: o número de (ou número médio de) grupos éster por molécula de éster de tiol, o número de (ou número médio de) grupos tiol por molécula de éster de tiol, o número de (ou número médio de) ligações duplas
10 carbono-carbono não reagidas por molécula de éster de tiol, o conteúdo médio de enxofre no tiol da composição de éster de tiol, a porcentagem (ou porcentagem média) de ligações de sulfeto por molécula de éster de tiol, e a porcentagem (ou porcentagem média) de grupos de sulfeto cíclico por
15 molécula de éster de tiol. Adicionalmente, as composições de éster de tiol podem ser descritas usando taxas individuais ou uma combinação de taxas incluindo a taxa de duplas ligações aos grupos de tiol, a taxa de sulfetos cíclicos para grupos mercaptanos, e similares. Como
20 elementos separados, estes grupos funcionais da composição de tiol serão descritos separadamente.

Minimamente, o éster de tiol contém moléculas de éster de tiol possuindo pelo menos um grupo éster e um grupo tiol por molécula de éster de tiol. Em personificações, o éster
25 de tiol pode ser preparado a partir de ésteres insaturados. Portanto, em algumas personificações, o éster de tiol pode conter o mesmo número de grupos éster como os ésteres insaturados dos quais são preparados, como aqui descrito. Em uma personificação, as moléculas de éster de tiol
30 possuem uma média de pelo menos 1,5 grupos éster por

molécula de éster de tiol. Alternativamente, as moléculas de éster de tiol podem possuir uma média de pelo menos 2 grupos éster por molécula de éster de tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 grupos éster por molécula de éster de tiol; ou alternativamente, uma média de pelo menos 3 grupos éster por molécula de éster de tiol. Em outras personificações, os ésteres de tiol podem ter uma média de 1,5 a 8 grupos de éster por molécula de éster de tiol; alternativamente, uma média de 2 a 7 grupos éster por molécula de éster de tiol; alternativamente, uma média de 2,5 a 5 grupos éster por molécula de éster de tiol; ou alternativamente, uma média de 3 a 4 grupos éster por molécula de éster de tiol. Em ainda outras personificações, o éster de tiol pode compreender uma média de cerca de 3 grupos éster por molécula de éster de tiol ou alternativamente, uma média de cerca de 4 grupos éster por molécula de éster de tiol.

Minimamente, o éster de tiol compreende um ou uma média de pelo menos um grupo tiol por molécula de éster de tiol. Em uma personificação, as moléculas de éster de tiol podem ter uma média de pelo menos 1,5 grupos tiol por molécula de éster de tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 2 grupos tiol por molécula de éster de tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 grupos tiol por molécula de éster de tiol; ou alternativamente, uma média de pelo menos 3 grupos de tiol por molécula de éster de tiol. Em outras personificações, as moléculas de ésteres de tiol podem ter uma média de 1,5 a 9 grupos por molécula de éster de tiol; alternativamente, uma média de 3 a 8 grupos éster por éster de tiol; alternativamente, uma

média de 2 a 4 grupos éster por éster de tiol; ou alternativamente, uma média de 4 a 8 grupos tiol por molécula de éster de tiol.

Em um aspecto, o éster de tiol pode ser descrito usando o número de grupos de tiol presentes no éster de tiol. Por exemplo, um éster de tiol referido como éster de tiol trimercaptano pode ser um éster de tiol contendo uma média entre 2,5 a 3,5 grupos de tiol por molécula de éster de tiol. Alternativamente, o éster de tiol trimercaptano pode conter uma média entre 2,75 a 3,25 grupos de tiol por molécula de éster de tiol. Como outro exemplo, um éster de tiol referido como éster de tiol dimercaptano pode ser um éster de tiol contendo uma média entre 1,5 a 2,5 grupos de tiol por molécula de éster de tiol; ou alternativamente, entre 1,75 e 2,25 grupos de tiol por molécula de éster de tiol.

Em outras personificações, o éster de tiol pode ainda ser descrito pela quantidade média de enxofre tiol presente no éster de tiol. Em uma personificação, as moléculas de éster de tiol possuem uma média de pelo menos 5 por cento do peso do enxofre de tiol por molécula de éster de tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 10 por cento do peso do enxofre de tiol por molécula de éster de tiol; ou alternativamente, uma média de mais de 15 por cento do peso do enxofre de tiol por molécula de éster de tiol. Em uma personificação, as moléculas de ésteres de tiol podem ter uma média de 5 a 25 por cento do peso do enxofre de tiol por molécula de éster de tiol; alternativamente, uma média de 5 a 20 por cento do peso do enxofre por molécula de éster de tiol; alternativamente, uma média de 6 a 15 por

cento do peso do enxofre de tiol por molécula de éster de tiol; ou alternativamente, uma média de 8 a 10 por cento do peso do enxofre por molécula de éster de tiol.

5 Geralmente, a localização do grupo tiol no éster de tiol não é particularmente importante e será ditada pelo método usado para produzir o éster de tiol. Em personificações onde o éster de tiol é produzido por contato de um éster insaturado com sulfeto de hidrogênio (um éster insaturado mercaptanizado), a posição do grupo
10 tiol será ditada pela posição da ligação dupla carbono-carbono. Quando a dupla ligação carbono-carbono é uma dupla ligação carbono-carbono interna, o método de produção do éster de tiol resultará em um grupo tiol secundário. Porém, quando a dupla ligação está localizada em uma
15 posição terminal, é possível escolher condições de reação para produzir um éster de tiol compreendendo um grupo tiol primário ou um grupo tiol secundário.

Alguns métodos de produção da composição do éster de tiol pode adicionalmente criar enxofre contendo grupos
20 funcionais além de um grupo tiol. Por exemplo, em alguns métodos de produção de éster de tiol, um grupo tiol introduzido pode reagir com uma dupla ligação carbono-carbono dentro do mesmo éster insaturado para produzir uma ligação de sulfeto. Quando a reação é com uma dupla
25 ligação de um segundo éster insaturado, uma ligação simples de sulfeto é produzida. Porém, em alguns casos, a segunda ligação dupla carbono-carbono está localizada na mesma molécula de éster insaturada. Quando o grupo tiol reage com uma segunda ligação dupla carbono-carbono dentro da
30 mesma molécula de éster insaturada, uma ligação de sulfeto

é produzida. Em algumas ocasiões, a dupla ligação carbono-carbono pode estar dentro de um segundo grupo éster da molécula de éster insaturada. Enquanto em outras ocasiões, a dupla ligação carbono-carbono pode estar dentro do mesmo grupo éster da molécula de éster insaturada.

Quando o grupo tiol reage com a ligação dupla carbono-carbono em um segundo grupo éster da mesma molécula de éster insaturada, o sulfeto contém pelo menos um grupo éster dentro de uma estrutura de anel. Em algumas personificações, quando o grupo tiol reage com a ligação dupla carbono-carbono em um segundo grupo éster da mesma molécula de éster insaturada, o sulfeto contém dois grupos éster dentro de uma estrutura de anel. Dentro desta especificação, o primeiro tipo de sulfeto contendo um grupo éster dentro da estrutura de anel é referido como um sulfeto simples. Quando o grupo tiol reage com a dupla ligação carbono-carbono dentro do mesmo grupo éster, o sulfeto não contém um grupo éster dentro da estrutura em anel. Dentro desta especificação, este segundo tipo de sulfeto é relacionado como sulfeto cíclico. No caso do sulfeto cíclico, a ligação do sulfeto produz uma funcionalidade de sulfeto cíclico dentro de um único grupo éster do éster de tiol. Os anéis de sulfeto cíclico que podem ser produzidos incluem um anel de tetrahidropirano, um anel de tietano, ou um anel de tiofano (anel de tetrahidrotiofeno).

Em algumas personificações, é desejável controlar a quantidade média de enxofre presente como sulfeto cíclico no éster de tiol. Em uma personificação, a quantidade média de enxofre presente como sulfeto cíclico nas

moléculas de éster de tiol compreende menos de 30 moles por cento. Alternativamente, a quantidade média de enxofre presente como sulfeto cíclico nos ésteres de tiol pode compreender menos de 20 moles por cento; alternativamente, 5 menos de 10 moles por cento; alternativamente, menos de 5 moles por cento; ou alternativamente, menos de 2 moles por cento. Em outras personificações, é desejável controlar a taxa molar de sulfetos cíclicos em grupos tiol. Em uma personificação, a taxa molar média de grupos de sulfeto 10 cíclico para grupos tiol por éster de tiol pode ser menos de 1,5. Alternativamente, a taxa molar média de grupos sulfeto cíclicos para grupos tiol por éster de tiol pode ser menos de 1; alternativamente, menos de 0,5; alternativamente, menos de 0,25; ou alternativamente, menos 15 de 0,1. Em algumas personificações, a taxa de grupos sulfeto cíclicos para grupos tiol por éster de tiol pode variar de 0 a 1; ou alternativamente, a taxa molar média de grupos sulfeto cíclicos para grupos tiol por éster de tiol pode variar entre 0,05 e 1.

20 Em algumas ocasiões, é desejável possuir duplas ligações carbono-carbono presentes na composição do éster de tiol, enquanto em outras personificações, pode ser desejável minimizar o número de duplas ligações de carbono presentes na composição do éster de tiol. A presença de 25 duplas ligações carbono-carbono no éster de tiol pode ser alegada como uma taxa molar média de ligações duplas carbono-carbono para tiol-enxofre. Em uma personificação, a taxa média das duplas ligações carbono-carbono remanescentes na composição do éster de tiol para o enxofre 30 do tiol pode ser menos de 1,5 por molécula de éster de

tiol. Alternativamente, a taxa media da dupla ligação carbono-carbono para o enxofre no tiol pode ser menos de 1,2 por molécula de éster de tiol; alternativamente, menos de 1,0 por molécula de éster de tiol; alternativamente, 5 menos de 0,75 por molécula de éster de tiol; alternativamente, menos de 0,5 por molécula de éster de tiol; alternativamente, menos de 0,2 por molécula de éster de tiol; ou alternativamente, menos de 0,1 por molécula de éster de tiol.

10 Em personificações particulares, o éster de tiol é produzido de composições de éster insaturado (um éster insaturado mercaptanizado). Devido ao éster insaturado possuir composições particulares possuindo um certo número de grupos éster presentes, a composição produto de éster de 15 tiol terá mais ou menos o mesmo número de grupos éster por molécula de éster de tiol do que o éster insaturado. Além disso, propriedades de éster de tiol independente são aqui descritas e podem ser usadas para descrever melhor a composição do éster de tiol.

20 Em um aspecto, o éster de tiol pode ser referido como éster insaturado mercaptanizado. Nestas personificações, o éster insaturado aqui descrito e/ou as descrições funcionais do éster insaturado aqui descritas podem ser utilizadas para indicar e/ou melhor descrever um éster 25 mercaptanizado em particular. Em alguns exemplos não-limitantes, o éster de tiol produzido por contato de um óleo de fonte natural com sulfeto de hidrogênio pode ser referido como óleo de fonte natural mercaptanizado, o éster de tiol produzido por contato de um óleo de soja com 30 sulfeto de hidrogênio pode ser referido como óleo de soja

mercaptanizado, e o éster de tiol produzido por contato de um óleo de rícino com sulfeto de hidrogênio pode ser referido como óleo de rícino mercaptanizado. Propriedades adicionais dos óleos de ésteres insaturados aqui descritos também podem ser utilizados para descrever melhor o óleo de éster insaturado e o óleo de éster mercaptanizado.

Em algumas personificações, as moléculas de éster de tiol são produzidas a partir de ésteres insaturados possuindo uma média de menos de 25 por cento do peso das cadeias laterais possuindo 3 ligações duplas carbono-carbono contíguas interrompidas por metileno, como aqui descrito. Em algumas personificações, mais de 40 por cento do tamanho total das cadeias laterais da molécula de éster de tiol pode incluir enxofre. Em algumas personificações, mais de 60 por cento do tamanho total das cadeias laterais da molécula de éster de tiol pode incluir enxofre. Em outras personificações, mais de 50, 70 ou 80 por cento do tamanho total das cadeias laterais da molécula de éster de tiol pode incluir enxofre.

Em uma personificação, o éster de tiol é um tiol contendo óleo de fonte natural, como aqui descrito. Quando o éster de tiol é um tiol contendo óleo de fonte natural, grupos funcionais que estão presentes no tiol contendo óleo de fonte natural podem ser descritos em uma base "por molécula de éster de tiol" ou em uma base "por triglicerídeos". O tiol contendo um óleo de fonte natural pode ter substancialmente as mesmas propriedades da composição de éster de tiol, como as taxas molares e outros elementos independentes descritivos descritos aqui.

O número médio de grupos tiol por triglicerídeos no

tiol contendo óleo de fonte natural é maior do que 1,5. Em algumas personificações, o número médio de grupos tiol por triglicerídeo pode variar de 1,5 a 9.

A composição de éster mercaptanizado insaturado também pode ser descrita como um produto produzido pelo processo compreendendo o contato do sulfeto de hidrogênio e uma composição de éster insaturado. Em outras palavras, a composição de éster insaturado é mercaptanizada para formar a composição de éster mercaptanizado insaturado. A composição de éster mercaptanizado insaturada também pode ser descrita usando um peso molecular ou um peso molecular médio das cadeias laterais. Todos os tributes usados para descrever a composição do éster de tiol podem ser usadas para descrever a composição de éster mercaptanizado insaturado.

COMPOSIÇÃO DO ÉSTER DE HIDROXI TIOL

Em um aspecto, a composição do éster de tiol usado como matéria prima para produzir os polímeros aqui descritos pode ser um éster de hidroxí tiol. O éster de hidroxí tiol pode ser descrito usando um número de métodos. Funcionalmente, o éster de hidroxí tiol pode ser descrito pelo tipo de grupos funcionais presentes no éster de hidroxí tiol. Nesta descrição funcional, a composição de éster de hidroxí tiol minimamente contém moléculas possuindo pelo menos um grupo éster, pelo menos um grupo tiol e pelo menos um grupo hidroxí. Em outras personificações, a composição do éster de tiol pode incluir ésteres de tiol com e sem grupos adicionais, ligações de polisulfeto -Sx-, onde x é um integrante maior que 1. Quando o éster de tiol possui um grupo hidroxí e um grupo

polisulfeto -Sx-, onde x é um integrante maior que 1, o éster de tiol pode ser referido como um éster de hidroxitiol de ligação cruzada.

Alternativamente, o éster de hidroxitiol pode ser descrito usando um nome que indique o método pelo qual foi formado. Por exemplo, um éster de hidroxitiol referido como éster epoxidizado mercaptanizado refere-se a um éster de hidroxitiol produzido pela reação de sulfeto de hidrogênio com um éster insaturado epoxidizado. O éster epoxidizado mercaptanizado pode ser ainda descrito utilizando os descritores funcionais dos ésteres de hidroxitiol presentes no éster epoxidizado mercaptanizado. Compostos que se adequam à descrição da composição do éster de hidroxitiol nem sempre se adequam à descrição do éster epoxidizado mercaptanizado. Por exemplo, enquanto o óleo de rícino mercaptanizado pode ser descrito usando algumas das definições do éster de hidroxitiol por virtude de possuir pelo menos um grupo éster, pelo menos um grupo tiol, e pelo menos um grupo hidroxil. O óleo de rícino mercaptanizado, porém, não é um éster epoxidizado mercaptanizado por ser produzido pelo contato do óleo de rícino com sulfeto de hidrogênio. Porém, o óleo de rícino epoxidizado mercaptanizado é um óleo de éster epoxidizado mercaptanizado por virtude de sua formação pelo contato do sulfeto de hidrogênio com óleo de rícino epoxidizado.

As composições de éster de tiol como matérias primas também podem conter um grupo hidroxil ou um grupo álcool. Quando a composição de éster de tiol inclui o grupo hidroxil, a composição de éster de tiol é aqui referido como a composição de éster de hidroxitiol. A quantidade ou

número de grupos de álcool presentes na composição de éster de hidroxí tiol pode ser independente da quantidade de outros grupos funcionais presentes na composição do éster do hidroxí tiol (p.ex., grupos tiol, grupos éster, sulfetos, sulfetos cíclicos). Adicionalmente, a porcentagem do peso do enxofre do tiol e taxas de grupos funcionais (p.ex., taxa molar de sulfetos cíclicos para grupos tiol, taxa molar de grupos de epóxido para grupos tiol, taxa molar de grupos de epóxido para grupos α -hidroxí tiol e outras quantidades reveladas de grupos funcionais e suas taxas molares para os grupos tiol) são separadas ou elementos discretos que podem ser usados para descrever a composição de éster de hidroxí tiol. A composição de éster de hidroxí tiol pode ser descrita usando qualquer combinação de grupos funcionais separados da composição de éster de hidroxí tiol ou taxas aqui descritas.

Em uma personificação, a composição de éster de hidroxí tiol pode ser produzida pela reação de sulfeto de hidrogênio com uma composição de éster epoxidizado insaturado como descrito nas 675 Aplicações. Quando a composição de éster de tiol é produzida por reação de um éster insaturado epoxidizado com sulfeto de hidrogênio, o material produzido pode ser referido como éster epoxidizado mercaptanizado. Devido ao éster insaturado epoxidizado pode conter múltiplos grupos epóxido, a reatividade do grupo epóxido e probabilidade estatística ditam que nem todas as moléculas de éster de hidroxí tiol da composição do éster de hidroxí tiol terá o mesmo número de grupos hidroxí, grupos tiol, grupos α -hidroxí tiol, sulfetos, sulfetos cíclicos, taxa molar de sulfetos cíclicos para

grupos tiol, taxa molar de grupos epóxido para grupos tiol, taxa molar de grupos epóxido para grupos α -hidroxi tiol, porcentagem do peso do enxofre do tiol, e/ou outras quantidades reveladas de grupos funcionais e suas taxas molares como a composição de éster insaturado epoxidizado. Assim, muitas destas propriedades serão discutidas como o número médio de taxas por molécula de éster de hidroxi tiol. Em outras personificações, deseja-se controlar o conteúdo de enxofre no tiol presente no éster de hidroxi tiol. Por ser difícil assegurar que o sulfeto de hidrogênio reaja com cada grupo epóxido dentro do éster epoxidizado insaturado, certas moléculas de éster de hidroxi tiol podem ter mais ou menos grupos tiol do que outras moléculas dentro da composição de éster de hidroxi tiol. Assim, a porcentagem do peso dos grupos tiol pode ser alegado como uma porcentagem média do peso de todas as moléculas de éster de hidroxi tiol.

Como uma personificação da presente invenção, a composição do éster de hidroxi tiol inclui moléculas de éster de hidroxi tiol que possuem uma média de pelo menos 1 grupo éster e uma média de pelo menos 1 grupo α -hidroxi tiol por molécula de éster de hidroxi tiol. Como uma personificação da presente invenção, a composição do éster de hidroxi tiol inclui moléculas de éster de hidroxi tiol que possuem uma média de pelo menos 1,5 grupo éster e uma média de pelo menos 1,5 grupo α -hidroxi tiol por molécula de éster de hidroxi tiol.

Alternativamente, em algumas personificações, o éster de hidroxi tiol compreende pelo menos um éster, pelo menos um grupo tiol, e pelo menos um grupo hidroxi. Assim, em

algumas personificações, a composição do éster de hidroxí tiol inclui moléculas de éster de hidroxí tiol que possuem uma média de pelo menos 1,5 grupo éster e uma média de pelo menos 1.5 grupo hidroxí tiol por molécula de hidroxí tiol.

5 Em personificações, o éster de hidroxí tiol pode ser preparado a partir do éster insaturado epoxidizado ou o éster insaturado. Assim, o éster de hidroxí tiol pode conter o mesmo número de grupos éster como o éster insaturado epoxidizado ou éster insaturado. Em uma
10 personificação, as moléculas de éster de hidroxí tiol possuem uma média de pelo menos 1,5 grupos éster por molécula de éster de hidroxí tiol. Alternativamente, as moléculas de éster de hidroxí tiol podem possuir uma média de pelo menos 2 grupos éster por molécula de éster de
15 hidroxí tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 grupos éster por molécula de éster de hidroxí tiol; ou alternativamente, uma média de pelo menos 3 grupos éster por molécula de éster de hidroxí tiol. Em outras personificações, os ésteres de hidroxí tiol podem ter uma
20 média de 1,5 a 8 grupos de éster por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de 2 a 7 grupos éster por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de 2,5 a 5 grupos éster por molécula de éster de hidroxí tiol; ou alternativamente, uma
25 média de 3 a 4 grupos éster por molécula de éster de hidroxí tiol. Em ainda outras personificações, o éster de hidroxí tiol pode compreender uma média de cerca de 3 grupos éster por molécula de éster de hidroxí tiol ou alternativamente, uma média de cerca de 4 grupos éster por
30 molécula de éster de hidroxí tiol.

Em algumas personificações, o grupo hidroxil e o grupo tiol são combinados no mesmo grupo (p.ex., quando o éster de hidroxil tiol é produzido a partir do éster insaturado epoxidizado), o grupo pode ser referido como um grupo α -hidroxil tiol. Em algumas personificações, o grupo tiol e o grupo hidroxil ou grupo álcool não estão no mesmo grupo. Nesta ocasião, a presença do grupo álcool não é dependente da formação do grupo tiol. Por exemplo, como outra personificação da presente invenção, a composição do éster de hidroxil tiol inclui moléculas de éster hidroxil tiol. As moléculas do éster de hidroxil tiol possuem uma média de pelo menos 1,5 grupos éster, uma média de pelo menos 1,5 grupos tiol, e uma média de pelo menos 1,5 grupos álcool por molécula de éster de hidroxil tiol.

Minimamente, em algumas personificações, o éster de hidroxil tiol compreende pelo menos um grupo tiol por molécula de éster de hidroxil tiol. Em uma personificação, as moléculas de éster de hidroxil tiol podem ter uma média de pelo menos 1,5 grupos tiol por molécula de éster de hidroxil tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 2 grupos tiol por molécula de éster de hidroxil tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 grupos tiol por molécula de éster de hidroxil tiol; ou alternativamente, uma média de pelo menos 3 grupos de tiol por molécula de éster de hidroxil tiol. Em outras personificações, as moléculas de ésteres de hidroxil tiol podem ter uma média de 1,5 a 9 grupos por molécula de éster de hidroxil tiol; alternativamente, uma média de 3 a 8 grupos éster por éster de hidroxil tiol; alternativamente, uma média de 2 a 4 grupos éster por éster de hidroxil tiol; ou

alternativamente, uma média de 4 a 8 grupos tiol por molécula de éster de hidroxí tiol.

Minimamente, em algumas personificações, a composição do éster de hidroxí tiol compreende uma média de pelo menos 1 grupo hidroxí ou grupo álcool por molécula de éster de hidroxí tiol. Em algumas personificações, as moléculas de éster de hidroxí tiol podem ter uma média de pelo menos 1,5 grupos hidroxí por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 2 grupos hidroxí por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 grupos hidroxí por molécula de éster de hidroxí tiol; ou alternativamente, uma média de pelo menos 3 grupos hidroxí por molécula de éster de hidroxí tiol. Em outras personificações, a composição de éster de tiol pode ter uma média de 1,5 a 9 grupos hidroxí por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de 3 a 8 grupos hidroxí por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de 2 a 4 grupos hidroxí por molécula de éster de hidroxí tiol; ou alternativamente, uma média de 4 a 8 grupos hidroxí por molécula de éster de hidroxí tiol.

Em ainda outras personificações, o número de grupos hidroxí pode ser alegado como uma taxa média molar de grupos hidroxí a grupos tiol. Minimamente, em algumas personificações, a taxa molar de grupos hidroxí para grupos tiol pode ser pelo menos 0,25. Em algumas personificações, a taxa molar de grupos hidroxí para grupos tiol pode ser pelo menos 0,5; alternativamente, pelo menos 0,75; alternativamente, pelo menos 1,0; alternativamente, pelo menos 1,25; ou alternativamente, pelo menos 1,5. Em outras

personificações, a taxa molar de grupos hidroxil a grupos tiol pode variar de 0,25 a 2,0; alternativamente, de 0,5 a 1,5; ou alternativamente, de 0,75 a 1,25.

Em personificações onde os ésteres de hidroxil tiol são produzidos a partir de um éster insaturado epoxidizado, os ésteres de hidroxil tiol podem ser descritos como grupos contendo éster e grupos de α -hidroxil tiol. Neste caso, os ésteres de hidroxil tiol que contêm grupos éster e grupos α -hidroxil tiol podem ser referidos como ésteres epoxidizados mercaptanizados. O número de grupos de éster e o número de grupos de α -hidroxil tiol são elementos independentes e, como tal, os ésteres de hidroxil tiol podem ser descritos como possuindo qualquer combinação de grupos éster e grupos α -hidroxil tiol aqui descritos. Minimamente, o éster de hidroxil tiol pode possuir uma média de pelo menos 1 grupo α -hidroxil tiol por molécula de éster de hidroxil tiol. Em algumas personificações, a composição de éster de hidroxil tiol podem ter uma média de pelo menos 1,5 grupos α -hidroxil tiol por molécula de éster de hidroxil tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 2 grupos α -hidroxil tiol por molécula de éster de hidroxil tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 grupos α -hidroxil tiol por molécula de éster de hidroxil tiol; ou alternativamente, uma média de pelo menos 3 grupos α -hidroxil tiol por molécula de éster de hidroxil tiol. Em outras personificações, a composição de éster de hidroxil tiol pode ter uma média de 1,5 a 9 grupos α -hidroxil tiol por molécula de éster de hidroxil tiol; alternativamente, uma média de 3 a 8 grupos α -hidroxil tiol por molécula de éster de hidroxil tiol; alternativamente, uma média de 2 a 4

grupos α -hidroxi tiol por molécula de éster de hidroxi tiol; ou alternativamente, uma média de 4 a 8 grupos α -hidroxi tiol por molécula de éster de hidroxi tiol.

Em um aspecto, o éster de hidroxi tiol pode ser descrito usando o número de grupos de tiol ou α -hidroxi tiol presentes no éster de hidroxi tiol. Por exemplo, um éster de hidroxi tiol referido como éster de hidroxi tiol trimercaptano pode ser um éster de hidroxi tiol contendo uma média entre 2,5 a 3,5 grupos de tiol ou α -hidroxi tiol por molécula de éster de hidroxi tiol. Alternativamente, o éster de hidroxi tiol trimercaptano pode conter uma média entre 2,75 a 3,25 grupos de tiol ou α -hidroxi tiol por molécula de éster de hidroxi tiol. Como outro exemplo, um éster de hidroxi tiol referido como éster de hidroxi tiol dimercaptano pode ser um éster de hidroxi tiol contendo uma média entre 1,5 a 2,5 grupos de tiol ou α -hidroxi tiol por molécula de éster de hidroxi tiol; ou alternativamente, entre 1,75 e 2,25 grupos de tiol ou α -hidroxi tiol por molécula de éster de hidroxi tiol.

Em um aspecto, o éster de hidroxi tiol pode ser descrito usando o número de grupos de álcool, α -hidroxi tiol, ou outros grupos funcionais presentes no éster de hidroxi tiol. Por exemplo, um éster de hidroxi tiol referido como éster de hidroxi tiol trifuncional pode ser um éster de hidroxi tiol contendo uma média entre 2,5 a 3,5 grupos de álcool, α -hidroxi tiol, ou outros grupos funcionais por molécula de éster de hidroxi tiol. Alternativamente, o éster de hidroxi tiol trifuncional pode conter uma média entre 2,75 a 3,25 grupos de álcool, α -hidroxi tiol, ou outros grupos funcionais por molécula de

éster de hidroxí tiol. Como outro exemplo, um éster de hidroxí tiol referido como éster de hidroxí tiol difuncional pode ser um éster de hidroxí tiol contendo uma média entre 1,5 a 2,5 grupos de álcool, α -hidroxí tiol, ou
5 outros grupos funcionais por molécula de éster de hidroxí tiol; ou alternativamente, entre 1,75 e 2,25 grupos de álcool, α -hidroxí tiol, ou outros grupos funcionais por molécula de éster de hidroxí tiol.

Os ésteres de hidroxí tiol podem ser produzidos por
10 contato de um éster epoxidizado derivado de um éster insaturado (p.ex., éster insaturado epoxidizado) com sulfeto de hidrogênio, como aqui descrito. Em algumas ocasiões, é desejável possuir grupos epóxido presentes na composição do éster de hidroxí tiol. Enquanto em outras
15 personificações, pode ser desejável minimizar o número de grupos epóxi presentes na composição de éster de hidroxí tiol. Assim, a presença de grupos epóxido residuais pode ser outro grupo funcional separado usado para descrever o éster de hidroxí tiol. Os ésteres de hidroxí tiol podem
20 incluir uma média de mais de 0 a 4 grupos epóxido por triglicerídeo. As composições de tiol também podem incluir uma média de mais de 1,5 a 9 grupos epóxido por triglicerídeo.

A presença de grupos epóxido no éster de hidroxí tiol
25 pode ser independentemente descrita como um número médio de grupos epóxido por éster de hidroxí tiol, uma taxa molar de grupos epóxido para grupos tiol, uma taxa molar de grupos epóxido para grupos α -hidroxí tiol, ou qualquer de suas combinações. Em algumas personificações, as moléculas de
30 éster de hidroxí tiol podem possuir uma média de menos de 2

grupos epóxido por molécula de éster de hidroxí tiol, p.ex., as moléculas de éster de hidroxí tiol possuem uma taxa molar de grupos epóxido para grupos α -hidroxí tiol de menos de 2. Alternativamente, o éster de hidroxí tiol pode
5 possuir uma média de menos de 1,5 grupos epóxido por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de menos de 1 grupo epóxido por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de menos de 0,75 grupos epóxido por molécula de éster de hidroxí tiol; ou
10 alternativamente, uma média de menos de 0,5 grupos epóxido por molécula de éster de hidroxí tiol. Em outras personificações, a taxa molar de grupos epóxido para grupos tiol pode ter a média menor do que 1,5. Alternativamente, a taxa molar dos grupos epóxido para grupos tiol pode em
15 média ser menor do que 1; alternativamente, em média menos do que 0,75; alternativamente, em média menos de 0,5; alternativamente, média menos do que 0,25; ou alternativamente, média menor que 0,1. Em outras personificações, a taxa molar de grupos epóxido para grupos
20 α -hidroxí tiol pode ter a média menor do que 1,5. Alternativamente, a taxa molar dos grupos epóxido para grupos α -hidroxí tiol pode em média ser menor do que 1; alternativamente, em média menos do que 0,75; alternativamente, em média menos de 0,5; alternativamente,
25 média menos do que 0,25; ou alternativamente, média menor que 0,1. Em ainda outras personificações, a composição de éster de hidroxí tiol é substancialmente livre de grupos epóxido.

Em outras personificações, o éster de hidroxí tiol
30 pode ainda ser descrito pela quantidade média de enxofre

tiol presente no éster de hidroxí tiol. Em uma personificação, as moléculas de éster de hidroxí tiol podem ter uma média de pelo menos 2,5 por cento do peso do enxofre tiol por molécula de éster de hidroxí tiol; 5 alternativamente, uma média de pelo menos 5 por cento do peso do enxofre tiol por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de pelo menos 10 por cento do peso do enxofre tiol por molécula de éster de hidroxí tiol; ou alternativamente, uma média de pelo mais de 15 por cento 10 do enxofre tiol por molécula de éster de hidroxí tiol. Em uma personificação, as moléculas de ésteres de hidroxí tiol podem ter uma média de 5 a 25 por cento do peso do enxofre de tiol por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de 5 a 20 por cento do peso do 15 enxofre por molécula de éster de hidroxí tiol; alternativamente, uma média de 6 a 15 por cento do peso do enxofre de tiol por molécula de éster de hidroxí tiol; ou alternativamente, uma média de 8 a 10 por cento do peso do enxofre por molécula de éster de hidroxí tiol.

20 Em algumas personificações, pelo menos 20 por cento das cadeias totais laterais inclui o grupo α -hidroxí tiol. Em algumas personificações, pelo menos 40 por cento das cadeias totais laterais inclui o grupo α -hidroxí tiol. Em algumas personificações, pelo menos 60 por cento do total 25 das cadeias laterais incluem o grupo α -hidroxí tiol; ou alternativamente, pelo menos 70 por cento do total das cadeias laterais incluem o grupo α -hidroxí tiol. Ainda em algumas personificações, pelo menos 80 por cento das cadeias totais laterais inclui o grupo α -hidroxí tiol.

30 Em alguns aspectos, mais de 20 por cento do tamanho

total das cadeias laterais da molécula de éster de hidroxí tiol contêm enxofre. Em alguns aspectos, mais de 40 por cento do tamanho total das cadeias laterais da molécula de éster de hidroxí tiol contêm enxofre. Em alguns aspectos, mais de 60 por cento das cadeias laterais totais da molécula do éster de hidroxí tiol contêm enxofre; alternativamente, mais de 70 por cento das cadeias laterais totais contêm enxofre; ou alternativamente, mais de 80 por cento das cadeias laterais totais contêm enxofre.

Em personificações particulares, o éster insaturado epoxidizado usado na síntese do éster de hidroxí tiol é produzido a partir da composição do éster insaturado epoxidizado que inclui um óleo de fonte natural epoxidizada. Devido aos óleos de fonte natural possuírem composições particulares com relação ao número de grupos éster presentes, o éster de hidroxí tiol terá mais ou menos o mesmo número de grupos éster do óleo de fonte natural. Outras propriedades independentes que são aqui descritas podem ser usadas para descrever melhor o éster de hidroxí tiol.

Em outras personificações, o éster insaturado epoxidizado usado para produzir o éster de hidroxí tiol é produzido a partir de óleos de éster insaturado sintético (ou semi-sintético). Devido aos óleos de éster sintético possuírem composições particulares com relação ao número de grupos éster presentes, o éster de hidroxí tiol terá mais ou menos o mesmo número de grupos éster do óleo de éster sintético. Outras propriedades independentes do éster insaturado, seja se o éster insaturado inclui óleos de fonte natural ou óleos sintéticos, podem ser usadas para

descrever melhor a composição do éster de hidroxí tiol.

Exemplos de ésteres adequados de hidroxí tiol incluem, mas não se limitam, óleos vegetais epoxidizados mercaptanizados, óleo de soja epoxidizado mercaptanizado, e
5 óleo de rícino epoxidizado mercaptanizado. Outros ésteres epoxidizados mercaptanizados adequados estão descritos nas 675 Aplicações e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção.

COMPOSIÇÕES DE ÉSTER DE TIOL DE LIGAÇÃO CRUZADA

10 Em um aspecto, as composições de éster de tiol de matérias primas incluem uma composição de éster de tiol de ligação cruzada. Geralmente, as moléculas de éster de tiol de ligação cruzada são oligômeros de ésteres de tiol que estão conectados juntos por ligações polisulfetos $-S_x-$,
15 onde x é um integrante maior do que 1. Como o éster de tiol de ligação cruzada é descrito como um oligômero dos ésteres de tiol, os ésteres de tiol podem ser descritos como o monômero a partir do qual os ésteres de tiol de ligação cruzada são produzidos. Em personificações, o éster de
20 tiol de ligação cruzada é produzido a partir de um éster insaturado mercaptanizado e pode ser chamado de éster insaturado mercaptanizado de ligação cruzada. Em outras personificações, o éster de tiol de ligação cruzada é produzido a partir de um éster de hidroxí tiol e pode ser
25 chamado de éster de hidroxí tiol de ligação cruzada. Em ainda outras personificações, o éster de tiol de ligação cruzada é produzido a partir de um éster epoxidizado mercaptanizado e pode ser chamado de éster de tiol epoxidizado mercaptanizado de ligação cruzada.

30 Em um aspecto, a composição do éster de tiol de

ligação cruzada compreende um oligômero do éster de tiol possuindo pelo menos dois monômeros do éster de tiol conectados por uma ligação polisulfeto possuindo uma estrutura -SQ-, onde Q é um integrante maior do que 1. Em
5 um aspecto, a ligação de polisulfeto pode ser a ligação de polisulfeto - SQ-, onde Q é 2, 3, ou 4, ou suas misturas. Em outras personificações, Q pode ser 2; alternativamente 3; ou alternativamente, 4.

Em um aspecto, a composição de éster de tiol de
10 ligação cruzada compreende um oligômero de éster de tiol possuindo pelo menos 3 monômeros de éster conectados por ligações polisulfetos; alternativamente, pelo menos 5 monômeros de éster de tiol conectados por ligações polisulfetos; alternativamente, pelo menos 7 monômeros de
15 éster de tiol conectados por ligações polisulfetos; ou alternativamente, pelo menos 10 monômeros de éster de tiol conectados por ligações polisulfetos. Em ainda outras personificações, a composição do éster de tiol de ligação cruzada compreende um oligômero do éster de tiol possuindo
20 de 3 a 20 monômeros do éster de tiol conectados por ligações polisulfetos; alternativamente, de 5 a 15 monômeros do éster de tiol conectados por ligações polisulfetos; ou alternativamente, de 7 a 12 monômeros do éster de tiol conectados por ligações polisulfetos.

25 Em um aspecto, a composição do éster de tiol de ligação cruzada compreende monômeros do éster de tiol e oligômeros do éster de tiol. Em algumas personificações, a composição do éster de tiol de ligação cruzada possui um monômero de éster de tiol combinado e um oligômero de éster
30 de tiol de peso médio molecular maior do que 2.000. Em

outras personificações, a composição do éster de tiol de ligação cruzada possui um monômero de éster de tiol combinado e um oligômero de éster de tiol de peso médio molecular maior do que 5.000; ou alternativamente, maior do
5 que 10.000. Em ainda outras personificações, a composição do éster de tiol de ligação cruzada possui um monômero de éster de tiol combinado e um oligômero de éster de tiol de peso médio molecular variando de 2.000 a 20.000; alternativamente, de 3.000 a 15.000; ou alternativamente,
10 de 7.500 a 12.500.

Em um aspecto os monômeros do éster de tiol e oligômeros do éster de tiol possuem um conteúdo total de enxofre maior do que 0,5 por cento do peso. Em outras personificações, os monômeros do éster de tiol e oligômeros
15 do éster de tiol possuem um conteúdo total de enxofre tiol maior do que 1 por cento do peso; alternativamente, maior do que 2 por cento do peso; ou alternativamente, maior do que 4 por cento do peso. Em ainda outras personificações, os monômeros do éster de tiol e os oligômeros do éster de
20 tiol possuem um conteúdo total de 0,5 por cento do peso a 8 por cento do peso; alternativamente, de 4 por cento do peso a 8 por cento do peso; ou alternativamente, 0,5 por cento do peso a 4 por cento do peso.

Em um aspecto os monômeros do éster de tiol e
25 oligômeros do éster de tiol possuem um conteúdo total de enxofre maior do que 8 por cento do peso. Em algumas personificações, os monômeros do éster de tiol e oligômeros do éster de tiol possuem um conteúdo total de enxofre maior do que 10 por cento do peso; ou alternativamente, maior do
30 que 12 por cento do peso. Em ainda outras personificações,

os monômeros do éster de tiol e os oligômeros do éster de tiol possuem um conteúdo total de enxofre variando de 8 por cento do peso a 15 por cento do peso; alternativamente, de 9 por cento do peso a 14 por cento do peso; ou
5 alternativamente, de 10 por cento do peso a 13 por cento do peso.

Em um aspecto, os ésteres de tiol de ligação cruzada das composições de éster de tiol de ligação cruzada podem ser descritos como sendo de alta ligação cruzada, de média
10 ligação cruzada, ou de baixa ligação cruzada. Geralmente, a quantidade de ligação cruzada nos ésteres de tiol de ligação cruzada pode ser controlada pela quantidade de enxofre utilizado na produção dos ésteres de tiol de ligação cruzada; p.ex., quanto maior a quantidade de
15 enxofre utilizado na produção do éster de tiol de ligação cruzada, maior a ligação cruzada na composição do éster de tiol de ligação cruzada. Devido ao enxofre elemental reagir com o grupo tiol da composição de éster de tiol, a quantidade de ligação cruzada pode ser determinada medindo-
20 se o conteúdo de enxofre tiol residual remanescente na composição do éster de tiol.

Em personificações, uma composição de éster de tiol de baixa ligação cruzada pode possuir uma média de 4,5 a 7,5 da porcentagem do peso do enxofre tiol; alternativamente,
25 de 5,0 a 7,0 da porcentagem do peso do enxofre tiol; ou alternativamente, de 5,5 a 6,5 da porcentagem do peso do enxofre tiol. Em personificações, uma composição de éster de tiol de média ligação cruzada pode ter uma média de 2,5 a 3,5 por cento do peso do enxofre tiol; ou
30 alternativamente, de 2,25 a 2,75 por cento do peso do

enxofre tiol. Em personificações, uma composição de éster de tiol de alta ligação cruzada pode possuir uma média de 0,75 a 2.25 da porcentagem do peso do enxofre tiol; alternativamente, de 1,0 a 2.0 da porcentagem do peso do enxofre tiol; ou alternativamente, de 1,25 a 1.75 da porcentagem do peso do enxofre tiol.

ÉSTERES INSATURADOS

A composição do éster insaturado usada como matéria prima para produzir as composições do éster de tiol aqui descritas pode ser descrita usando um número de métodos diferentes. Um método de descrição da matéria prima de éster insaturado é pelo número de grupos éster e o número de duplas ligações carbono-carbono que compreendem cada molécula de óleo de éster insaturado. Ésteres insaturados adequados usados como matéria prima para produzir as composições de éster de tiol aqui descritas minimamente compreendem pelo menos 1 grupo éster e pelo menos uma dupla ligação carbono-carbono. Porém, além deste requisito, o número de grupos de éster e ligações duplas carbono-carbono compreendendo os ésteres insaturados são elementos independentes e podem variar independentemente um do outro. Assim, os ésteres insaturados podem ter qualquer combinação do número de grupos de ésteres e o número de ligações duplas carbono-carbono aqui descritas separadamente. Ésteres adequados, insaturados, também podem conter grupos funcionais adicionais como álcool, aldeído, cetona, epóxi, éter, grupos aromáticos, e suas combinações. Como um exemplo, os ésteres insaturados também compreendem grupos hidroxí. Um exemplo de um éster insaturado que contém grupos hidroxí é o óleo de rícino. Outros ésteres

insaturados adequados serão aparentes àqueles habilitados na tecnologia e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção.

Minimamente, o éster insaturado compreende pelo menos
5 um grupo éster. Em outras personificações, o éster insaturado compreende pelo menos 2 grupos éster. Alternativamente, o éster insaturado compreende 3 grupos éster. Alternativamente, o éster insaturado compreende 4 grupos éster. Alternativamente, o éster insaturado inclui
10 de 2 a 8 grupos éster. Alternativamente, o éster insaturado inclui de 2 a 7 grupos éster. Alternativamente, o éster insaturado inclui de 3 a 5 grupos éster. Como outra alternativa, o éster insaturado inclui de 3 a 4 grupos éster.

15 Em outras personificações, o éster insaturado compreende uma mistura de ésteres insaturados. Nestas situações, o número de grupos éster é melhor descrito como um número médio de grupos éster por molécula de éster insaturado compreendendo a composição do éster insaturado.
20 Em algumas personificações, as moléculas de éster insaturados podem ter uma média de pelo menos 1.5 grupos éster por molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de pelo menos 2 grupos éster por molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de pelo menos
25 2,5 grupos éster por molécula de éster insaturado; ou alternativamente, uma média de pelo menos 3 grupos éster por molécula de éster insaturado. Em outras personificações, os ésteres insaturados podem ter uma média de 1,5 a 8 grupos de éster por molécula de éster
30 insaturado; alternativamente, uma média de 2 a 7 grupos

éster por molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de 2,5 a 5 grupos éster por molécula de éster insaturado; ou alternativamente, uma média de 3 a 4 grupos éster por molécula de éster insaturado. Em outra personificação, os ésteres insaturados possuem uma média de mais ou menos 3 grupos éster por molécula de éster insaturado; ou alternativamente, uma média de cerca de 4 grupos éster por molécula de éster insaturado.

Minimamente, o éster insaturado compreende pelo menos uma ligação dupla carbono-carbono por molécula de éster insaturado. Em uma personificação, o éster insaturado compreende pelo menos 2 ligações duplas carbono-carbono; alternativamente, pelo menos 3 ligações duplas carbono-carbono; ou alternativamente, pelo menos 4 ligações duplas carbono-carbono. Em outras personificações, o éster insaturado compreende de 2 a 9 ligações duplas carbono-carbono; alternativamente, de 2 a 4 ligações duplas carbono-carbono; alternativamente, de 3 a 8 ligações duplas carbono-carbono; ou alternativamente, de 4 a 8 ligações duplas carbono-carbono.

Em outras personificações, o éster insaturado compreende uma mistura de ésteres insaturados. Neste aspecto, o número de ligações duplas carbono-carbono na mistura de éster insaturado é melhor descrito como um número médio de ligações duplas carbono-carbono por molécula de óleo de éster insaturado. Em algumas personificações, os ésteres insaturados podem ter uma média de pelo menos 1,5 ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de pelo menos 2 ligações duplas carbono-carbono por

molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado; ou alternativamente, uma média de pelo menos 3 ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado. Em algumas personificações, os ésteres insaturados podem ter uma média de pelo menos 1,5 a 9 ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de 3 a 8 ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de 2 a 4 ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado; ou alternativamente, uma média de 4 a 8 ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado.

Enquanto o número (ou número médio) de grupos éster e o número (ou número médio) de ligações duplas são elementos independentes dos ésteres insaturados, personificações particulares são citadas para fins ilustrativos. Em uma personificação, as moléculas de éster insaturado possuem uma média de pelo menos 1,52 grupos éster por molécula de éster insaturado e possuem uma média de pelo menos 1,5 ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado. Alternativamente, as moléculas de éster insaturado possuem uma média de pelo menos 3 grupos éster por molécula de éster insaturado e possuem uma média de pelo menos 1,5 ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado. Alternativamente, as moléculas de éster insaturado possuem uma média de pelo menos 3 grupos éster por molécula de éster insaturado e possuem uma média de pelo menos 1,5 a 9 ligações duplas carbono-carbono por molécula de éster insaturado. Como outra alternativa, as

moléculas de éster insaturado possuem uma média de 2 a 8 grupos éster por molécula de éster insaturado e possuem uma média de 1,5 a 9 ligações duplas carbono-carbono por óleo de éster insaturado.

5 Além do número (ou número médio) de grupos éster e o número (ou número médio) de ligações duplas carbono-carbono presentes nas moléculas de éster insaturado, a disposição das ligações duplas carbono-carbono nas moléculas de éster insaturado possuindo 2 ou mais ligações duplas carbono-carbono pode ser uma consideração. Em algumas personificações, onde as moléculas de éster insaturado possuem 2 ou mais ligações duplas carbono-carbono, as ligações duplas carbono-carbono podem ser conjugadas. Em outras personificações, as ligações duplas carbono-carbono podem ser separadas umas das outras por apenas um átomo de carbono. Quando duas ligações duplas carbono-carbono são separadas por um átomo de carbono possuindo dois átomos de hidrogênio anexo a elas, p.ex., um grupo metileno, estas ligações duplas carbono-carbono podem ser denominadas como
10 ligações duplas interrompidas por metileno. Em ainda outras personificações, as ligações duplas carbono-carbono são isoladas, p.ex., as ligações duplas carbono-carbono são separadas umas das outras por 2 ou mais átomos de carbono. Em outras personificações, as ligações duplas carbono-carbono podem ser conjugadas com um grupo carbonil.
15 20 25

Em alguns aspectos, o éster insaturado pode ser descrito como um éster de um poliol e ácidos carboxílicos insaturados. Dentro desta descrição, a porção do ácido carboxílico insaturada do éster insaturado pode ser chamada
30 de cadeia lateral de poliol (ou mais simples, uma cadeia

lateral). Em algumas personificações, o éster insaturado compreende menos de 30 por cento das cadeias laterais compreendendo ligações duplas interrompidas por metileno. Em algumas personificações, o éster insaturado compreende mais de 30 por cento das cadeias laterais compreendendo ligações duplas interrompidas por metileno. Em ainda outras personificações, o éster insaturado compreende menos de 25 por cento das cadeias laterais possuindo 3 ligações duplas interrompidas por metileno contíguas. Em outras personificações, o éster insaturado compreende menos de 25 por cento das cadeias laterais linoléicas. Em ainda outras personificações, o éster insaturado compreende mais de 25 por cento das cadeias laterais possuindo 3 ligações duplas interrompidas por metileno contíguas. Em outras personificações, o éster insaturado compreende mais de 25 por cento das cadeias laterais linoléicas. Em outras personificações, o éster insaturado compreende pelo menos 30 por cento das cadeias laterais possuindo 2 ligações duplas carbono-carbono interrompidas por metileno contíguas e menos de 25 por cento de cadeias laterais possuindo 3 ligações duplas carbono-carbono interrompidas por metileno contíguas.

Grupos funcionais adicionais também podem estar presentes no éster insaturado. Uma lista não-limitante de grupos funcionais incluem um grupo hidroxí, um grupo éter, um grupo aldeído, um grupo cetona, um grupo amina, um grupo ácido carboxílico, entre outros, e suas combinações. Em um aspecto, os ésteres insaturados também podem compreender grupos hidroxí. Em algumas personificações, os ésteres insaturados podem ter uma média de pelo menos 1,5 grupos

hidroxi por molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de pelo menos 2 grupos hidroxi por molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 grupos hidroxi por molécula de éster insaturado; ou
5 alternativamente, uma média de pelo menos 3 grupos hidroxi por molécula de éster insaturado. Em outras personificações, os ésteres insaturados podem ter uma média de 1,5 a 9 grupos hidroxi por molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de 3 a 8 grupos hidroxi por
10 molécula de éster insaturado; alternativamente, uma média de 2 a 4 grupos hidroxi por molécula de éster insaturado; ou alternativamente, uma média de 4 a 8 grupos hidroxi por molécula de éster insaturado. Em uma personificação, o éster insaturado compreende pelo menos 2 grupos hidroxi;
15 alternativamente, pelo menos 3 grupos hidroxi; ou alternativamente, pelo menos 4 grupos hidroxi. Em outras personificações, o éster insaturado compreende de 2 a 9 grupos hidroxi; alternativamente, de 2 a 4 grupos hidroxi; alternativamente, de 3 a 8 grupos hidroxi; ou
20 alternativamente, de 4 a 8 grupos hidroxi.

O éster insaturado utilizado para produzir o éster de tiol utilizado em aspectos desta invenção pode ser qualquer éster insaturado possuindo o número de grupos éster e ligações duplas carbono-carbono por éster insaturado aqui
25 descrito. O éster insaturado pode ser derivado de fontes naturais, sinteticamente produzido a partir de matérias primas de fontes naturais, produzido de matérias primas sintéticas, produzido de uma mistura de materiais sintéticos e naturais, ou suas combinações.

Em uma personificação, o éster insaturado é um óleo insaturado de fonte natural. O óleo insaturado de fonte natural pode ser derivado de nozes, vegetais, plantas e animais. Em uma personificação, o éster insaturado
5 compreende um triglicerídeo derivado de nozes, vegetais, plantas e animais comuns na natureza. Em uma personificação, o éster insaturado pode ser derivado de nozes, vegetais, plantas e animais geneticamente modificados. Em uma personificação, o óleo do éster
10 insaturado compreende um triglicerídeo derivado de nozes, vegetais, plantas e animais geneticamente modificados.

Em um aspecto, o óleo insaturado de fonte natural pode ser gordura animal, oliva, amendoim, rícino, girassol, gergelim, papoula, sementes, palmeira, amêndoa, avelã,
15 colza, canola, soja, milho, açafroa, canola, semente de algodão, camelina, semente de linho ou óleo de noz. Em outra personificação, o óleo insaturado de fonte natural pode ser soja, milho, rícino, açafroa, canola, semente de algodão, camelina, semente de linho ou óleo de noz. Em
20 outras personificações, o óleo insaturado de fonte natural pode ser óleo de soja; alternativamente, óleo de milho; alternativamente, óleo de rícino; ou alternativamente, óleo de canola.

Os óleos insaturados de fonte natural são formados por
25 triglicerídeos que podem ser descritos como um éster do glicerol e um ácido carboxílico insaturado. Dentro desta descrição, a porção do ácido carboxílico insaturada do triglicerídeo pode ser chamada de cadeia lateral de glicerol (ou mais simples, uma cadeia lateral). Em algumas
30 personificações, o triglicerídeo compreende menos de 30 por

cento das cadeias laterais compreendendo ligações duplas interrompidas por metileno. Em algumas personificações, o triglicerídeo compreende mais de 30 por cento das cadeias laterais compreendendo ligações duplas interrompidas por metileno. Em ainda outras personificações, o triglicerídeo compreende menos de 25 por cento das cadeias laterais possuindo 3 ligações duplas interrompidas por metileno contíguas. Em outras personificações, o triglicerídeo compreende menos de 25 por cento das cadeias laterais linolêicas. Em ainda outras personificações, o triglicerídeo compreende mais de 25 por cento das cadeias laterais possuindo 3 ligações duplas interrompidas por metileno contíguas. Em outras personificações, o triglicerídeo compreende menos de 25 por cento das cadeias laterais linolêicas. Em outras personificações, o triglicerídeo compreende pelo menos 30 por cento das cadeias laterais possuindo 2 ligações duplas carbono-carbono interrompidas por metileno contíguas e menos de 25 por cento de cadeias laterais possuindo 3 ligações duplas carbono-carbono interrompidas por metileno contíguas.

Em outra personificação, o óleo insaturado de éster natural compreende triglicerídeos "naturais" derivados de óleos insaturados de fontes naturais. Em uma personificação, o óleo insaturado de éster é sintético. Em uma personificação, o óleo insaturado de éster compreende matérias primas sintéticas e naturais. Em uma personificação, o óleo insaturado de éster compreende triglicerídeos sintéticos.

ÉSTERES INSATURADOS SINTÉTICOS

Ésteres insaturados sintéticos usados como matéria

prima para aspectos desta invenção podem ser produzidos usando métodos para produção de um grupo éster conhecidos dos habilitados na tecnologia. O termo "grupo éster" significa uma metade formada a partir da reação de um grupo

5 hidroxí e um ácido carboxílico ou um derivado do ácido carboxílico. Tipicamente, os ésteres podem ser produzidos por reação de um álcool com um ácido carboxílico, transesterificação do éster do ácido carboxílico com um álcool, reação de um álcool com um anidrido de ácido

10 carboxílico, ou reação de um álcool com uma halida de ácido carboxílico. Qualquer um destes métodos pode ser usado para produzir os óleos insaturados de éster sintéticos usados como matéria prima em um aspecto desta invenção. O álcool, ácido carboxílico insaturado, éster de ácido

15 carboxílico insaturado, matérias primas de anidrido de ácido carboxílico insaturado para a produção do óleo insaturado de éster podem ser derivados de fontes naturais, genéticas, ou qualquer combinação de fontes naturais, genéticas, e sintéticas.

20 Os polióis e os ácidos carboxílicos insaturados, ésteres de ácidos carboxílicos insaturados simples, ou anidridos de ácidos carboxílicos insaturados usados para produzir os ésteres insaturados usados como matéria prima em vários aspectos desta invenção são elementos

25 independentes. Isto é, estes elementos podem variar independentemente um do outro, e assim, podem ser usados em qualquer combinação para produzir um éster insaturado utilizado como matéria prima para produzir as composições descritas nesta aplicação ou como matéria prima para os

30 processos descritos nesta aplicação.

ÓLEOS INSATURADOS DE ÉSTER SINTÉTICOS - COMPONENTE POLIOL

O poliol usado para produzir o óleo insaturado de éster pode ser qualquer poliol ou mistura de polióis capazes de reagir com um ácido carboxílico insaturado, éster de ácido carboxílico simples insaturado, anidrido de ácido carboxílico, ou halida de ácido carboxílico sob condições de reação aparentes àqueles habilitados na tecnologia.

O número de átomos de carbono no poliol pode ser variado. Em um aspecto, o poliol usado para produzir o éster insaturado pode compreender de 2 a 20 átomos de carbono. Em outras personificações, o poliol compreende de 2 a 10 átomos de carbono; alternativamente, de 2 a 7 átomos de carbono; ou alternativamente, de 2 a 5 átomos de carbono. Em outras personificações, o poliol pode ser uma mistura de polióis possuindo uma média de 2 a 20 átomos de carbono; alternativamente, uma média de 2 a 10 átomos de carbono; alternativamente, uma média de 2 a 7 átomos de carbono; ou alternativamente, uma média de 2 a 5 átomos de carbono.

Em outro aspecto, o poliol usado para produzir o éster insaturado pode possuir qualquer número de grupos hidroxil necessários para produzir o éster insaturado como aqui descrito. Em algumas personificações, o poliol possui 2 grupos hidroxil; alternativamente, 3 grupos hidroxil; alternativamente, 4 grupos hidroxil; alternativamente, 5 grupos hidroxil; ou alternativamente, 6 grupos hidroxil. Em outras personificações, o poliol compreende pelo menos 2 grupos hidroxil; alternativamente, pelo menos 3 grupos hidroxil; alternativamente, pelo menos 4 grupos hidroxil;

alternativamente, pelo menos 5 grupos hidroxil; ou
alternativamente, pelo menos 6 grupos hidroxil. Em ainda
outras personificações, o poliol compreende de 2 a 8 grupos
hidroxil; alternativamente, de 2 a 4 grupos hidroxil; ou
5 alternativamente, de 4 a 8 grupos hidroxil.

Em outros aspectos, o poliol usado para produzir o
éster insaturado é uma mistura de polióis. Em uma
personificação, a mistura de polióis possui uma média de
pelo menos 1,5 grupos hidroxil por molécula de poliol. Em
10 outras personificações, a mistura de polióis possui uma
média de pelo menos 2 grupos hidroxil por molécula de poliol;
alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 grupos
hidroxil por molécula de poliol; alternativamente, uma média
de pelo menos 3,0 grupos hidroxil por molécula de poliol; ou
15 alternativamente, uma média de pelo menos 4 grupos hidroxil
por molécula de poliol. Em ainda outras personificações, a
mistura de polióis possui uma média de 1,5 a 8 grupos
hidroxil por molécula de poliol; alternativamente, uma média
de 2 a 6 grupos hidroxil por molécula de poliol;
20 alternativamente, uma média de 2,5 a 5 grupos hidroxil por
molécula de poliol; alternativamente, uma média de 3 a 4
grupos hidroxil por molécula de poliol; alternativamente,
uma média de 2,5 a 3,5 grupos hidroxil por molécula de
poliol; ou alternativamente, uma média de 2,5 a 4,5 grupos
25 hidroxil por molécula de poliol.

Em ainda outro aspecto, o poliol ou mistura de polióis
usados para produzir o éster de tiol insaturado possui um
peso molecular ou peso médio molecular de menos de 1000. Em
outras personificações, o poliol ou mistura de polióis
30 possui um peso molecular ou peso médio molecular de menos

de 500; alternativamente, menos de 300; alternativamente, menos de 200; alternativamente, menos de 150; ou alternativamente, menos de 100.

Em algumas personificações, polióis adequados incluem

5 1,2-etanodiol, 1,3-propanodiol, 1,4-butanodiol, 1,5-pentanodiol, 1,6-hexanodiol, dimetilolpropano, neopentil glicol, 2-propil-2-etil-1,3-propanodiol, 1,2-propanodiol, 1,3-butanodiol, dietileno glicol, trietileno glicol, polietileno glicol, dipropileno glicol, tripropileno

10 glicol, polipropileno glicol, ciclohexanodimetanol, 1,3-dioxano-5,5-dimetanol, 1,4-xililenodimetanol, 1-fenil-1,2-etanodiol, trimetilolpropano, trimetiloletano, trimetilolbutano, glicerol, 1,2,5-hexanotriol, pentaeritritol, ditrimetilolpropano, diglicerol,

15 ditrimetiloletano, 1,3,5-trihidroxibenzeno, 1,4-xililenodimetanol, 1-fenil-1,2-etanodiol, ou qualquer uma de suas combinações. Em outras personificações, o poliol é glicerol, pentaeritritol, ou suas misturas. Em outras personificações, o poliol é glicerol; ou alternativamente,

20 pentaeritritol. Em um aspecto, o poliol é óleo de rícino.

ÉSTER INSATURADO SINTÉTICO - ÁCIDO CARBOXÍLICO OU ÁCIDO
CARBOXÍLICO DE COMPONENTE EQUIVALENTE

O ácido carboxílico componente do óleo insaturado de éster pode ser qualquer ácido carboxílico ou mistura de

25 ácidos carboxílicos compreendendo uma ligação dupla carbono-carbono. Como o componente de ácido carboxílico será combinado com um poliol ou mistura de polióis compreendendo uma média maior do que 1,5 grupos hidroxí ou qualquer outro número de grupos hidroxí aqui descritos, o

30 componente de ácido carboxílico pode ser qualquer mistura

compreendendo ácidos carboxílicos insaturados que produzem um óleo insaturado de éster que satisfaz o requisito da matéria prima aqui descrito. Em algumas personificações, o componente do ácido carboxílico pode ser qualquer mistura
5 de ácido carboxílico saturado e ácido carboxílico insaturado que produza um óleo insaturado de éster que satisfaça os requisitos da matéria prima aqui descritos. Assim, o ácido carboxílico ou mistura de ácido carboxílico usado para produzir o óleo insaturado de éster sintético
10 pode ser descrito como possuindo um número médio de um elemento específico por ácido carboxílico.

Elementos independentes do ácido carboxílico incluem o número médio de grupos de ácido carboxílico por molécula de ácido carboxílico, o número médio de átomos de carbono
15 presentes no ácido carboxílico, e o número médio de ligações duplas carbono-carbono por ácido carboxílico. Elementos independentes adicionais incluem a posição da dupla ligação na cadeia de carbono e a posição relativa das duplas ligações com relação a cada uma quando há múltiplas
20 duplas ligações.

Ácidos carboxílicos específicos usados como componentes da composição do ácido carboxílico para produzir o óleo insaturado de éster podem possuir de 3 a 30 átomos de carbono por molécula de ácido carboxílico. Em
25 algumas personificações, o ácido carboxílico é linear. Em algumas personificações, o ácido carboxílico é ramificado. Em algumas personificações, o ácido carboxílico é uma mistura de ácidos carboxílicos lineares e ramificados. Em algumas personificações, o ácido carboxílico também pode
30 compreender grupos funcionais adicionais incluindo álcoois,

aldeídos, cetonas, e epóxidos, entre outros.

Ácidos carboxílicos adequados que podem ser usados como componente da composição do ácido carboxílico insaturado podem possuir de 3 a 30 átomos de carbono; 5 alternativamente, de 8 a 25 átomos de carbono; ou alternativamente, de 12 a 20 átomos de carbono. Em outras personificações, os ácidos carboxílicos compreendendo a composição do ácido carboxílico insaturado compreende uma média de 2 a 30 átomos de carbono; alternativamente, uma 10 média de 8 a 25 átomos de carbono; ou alternativamente, uma média de 12 a 20 átomos de carbono.

A dupla ligação carbono-carbono pode estar localizado em qualquer ponto na extensão da cadeia carbono-carbono. Em uma personifiicação, a dupla ligação pode ser localizada 15 em uma posição terminal. Em outra personificação, a dupla ligação carbono-carbono pode estar localizada em uma posição interna. Em ainda outra personificação, o ácido carboxílico ou mistura de ácidos carboxílicos pode compreender duplas ligações terminais e internas carbono- 20 carbono. A dupla ligação pode também ser descrita indicando o número de substituentes que estão anexos à ligação dupla carbono-carbono. Em algumas personificações, a dupla ligação carbono-carbono pode ser mono-substituída, disubstituída, trisubstituída, tetrasubstituída, ou uma 25 mistura de ácidos carboxílicos que pode ter qualquer combinação de ligações duplas carbono-carbono mono-substituídas, disubstituídas, trisubstituídas e tetrasubstituídas.

Ácidos carboxílicos insaturados adequados incluem 30 acrílico, agonadólico, agonândrico, alcornóico, ambretólico,

angélico, asclépico, auricólico, avenoléico, axilarênico, brassídico, caproléico, cetalaídico, cetoléico, civético, coriólico, coronárico, crepenínico, densipólico, dihomolinoléico, dihomotaxoléico, dimorfecólico, elaídico, 5 efedrênico, erúcico, gadelaídico, gadoléico, gaídico, gôndolo, gondoléico, górlico, heleninólico, hidroscórbico, isoricinoléico, queteleerônico, labelênico, lauroléico, lesquerólico, linelaídico, lindérico, linoléico, luméquico, malvático, ácido de mangold, margarólico, megatômico, ácido 10 de mikusch, micolipênico, miristelaídico, nervóico, obtusílico, oléico, palmitelaídico, petroselaídico, petroselínico, flômico, fisetérico, ftenóico, pirúlico, ricinelaídico, rumênico, selacoléico, sórbico, estearólico, estercúlico, esterculínico, estilíngico, estrofanto, 15 tarírico, taxoléico, traumático, tsuduico, tsuzuico, undecilênico, vaccênico, vernólico, ximênico, ximenínico, ximeninólico, e suas combinações. Em outras personificações, ácidos carboxílicos insaturados adequados incluem oléico, palmitoléico, ricinoléico, linoléico, ou 20 qualquer de suas combinações. Outros ácidos carboxílicos insaturados adequados serão aparentes àqueles habilitados na tecnologia e devem ser considerados dentro do escopo da presente invenção, assim como suas combinações.

Em algumas personificações, o éster insaturado pode 25 ser produzido por transesterificação de um éster simples do ácido carboxílico ou mistura de ácidos carboxílicos aqui descritos com as composições de polióis aqui descritas. Em algumas personificações, o éster simples é um metil ou etil éster do ácido carboxílico, ou uma mistura de ácidos 30 carboxílicos. Em algumas personificações, o éster de ácido

carboxílico simples é um metil éster dos ácidos carboxílicos aqui descritos.

ÉSTERES INSATURADOS EPOXIDIZADOS

Em um aspecto, ésteres insaturados epoxidizados são
5 usados como matéria prima para produzir materiais aqui descritos e para processos de produção de materiais aqui descritos. Geralmente, o éster insaturado epoxidizado pode ser derivado por epoxidização de qualquer éster insaturado descrito aqui. O óleo insaturado de éster pode ser
10 derivado de fontes naturais, sinteticamente produzido a partir de matérias primas de fontes naturais, produzido de matérias primas sintéticas, produzido de uma mistura de materiais sintéticos e naturais, ou suas combinações.

Minimamente, o éster insaturado epoxidizado compreende
15 pelo menos um grupo epóxi. Em uma personificação, o éster insaturado epoxidizado compreende pelo menos 2 grupos epóxi; alternativamente, pelo menos 3 grupos epóxi; ou alternativamente, pelo menos 4 grupos epóxi. Em outras personificações, o éster insaturado epoxidizado compreende
20 de 2 a 9 grupos epóxi; alternativamente, de 2 a 4 grupos epóxi; alternativamente, de 3 a 8 grupos epóxi; ou alternativamente, de 4 a 8 grupos epóxi.

Em outras personificações, o éster insaturado compreende uma mistura de ésteres insaturados epoxidizados.
25 Neste aspecto, o número de grupos epóxi no éster insaturado epoxidizado pode ser descrito como um número médio de grupos epóxi por molécula de éster insaturado epoxidizado. Em algumas personificações, os ésteres insaturados epoxidizados podem ter uma média de pelo menos
30 1,5 grupos epóxi por molécula de éster insaturado

epoxidizado; alternativamente, uma média de pelo menos 2 grupos epóxido por molécula de éster insaturado epoxidizado; alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 grupos epóxido por molécula de éster insaturado epoxidizado; ou alternativamente, uma média de pelo menos 3 grupos epóxido por molécula de éster insaturado epoxidizado. Em outras personificações, os ésteres insaturados epoxidizados podem ter uma média de 1,5 a 9 grupos epóxido por molécula de éster insaturado epoxidizado; alternativamente, uma média de 3 a 8 grupos epóxido por molécula de éster insaturado epoxidizado; alternativamente, uma média de 2 a 4 grupos epóxido por molécula de éster insaturado epoxidizado; ou alternativamente, uma média de 4 a 8 grupos epóxido por molécula de éster insaturado epoxidizado.

Em um aspecto, o éster insaturado epoxidizado pode ser um óleo insaturado epoxidizado de fonte natural. O óleo insaturado de fonte natural pode ser derivado de nozes, vegetais, plantas e animais. Em uma personificação, o óleo insaturado de éster pode ser derivado de nozes, vegetais, plantas e animais geneticamente modificados. Em uma personificação, o óleo do éster insaturado compreende um triglicerídeo derivado de nozes, vegetais, plantas e animais geneticamente modificados.

Em um aspecto, o óleo insaturado epoxidizado de fonte natural pode ser gordura animal, oliva, amendoim, rícino, girassol, gergelim, papoula, sementes, palmeira, amêndoa, avelã, colza, canola, soja, milho, açafroa, canola, semente de algodão, camelina, semente de linho ou óleo de noz. Em outra personificação, o óleo insaturado epoxidizado de

fonte natural pode ser soja, milho, rícino, açafoa, canola, semente de algodão, camelina, semente de linho ou óleo de noz. Em outras personificações, o óleo insaturado epoxidizado de fonte natural pode ser óleo de soja; 5 alternativamente, óleo de milho; alternativamente, óleo de rícino; ou alternativamente, óleo de canola.

ISOCIANATOS

Em um aspecto, as composições de tiouretano da presente invenção pode ser produzido por contato da 10 composição de éster de tiol com a composição de isocianato. Geralmente, a composição de isocianato compreende um isocianato possuindo pelo menos um grupo isocianato. Em personificações, a composição de isocianato é compreendida de moléculas possuindo múltiplos grupos isocianato. Em 15 algumas personificações, a composição do isocianato compreende uma mistura de moléculas de isocianato. Quando a composição de isocianato compreende uma mistura de moléculas de isocianato, as moléculas de isocianato podem ter uma média de pelo menos 1,5 grupos de isocianato por 20 molécula de isocianato; alternativamente, uma média de pelo menos 2 grupos isocianato por molécula de isocianato; alternativamente, uma média de pelo menos 2,5 grupos isocianato por molécula de isocianato; ou alternativamente, uma média de pelo menos 3 grupos isocianato por molécula de 25 isocianato. Em personificações, as moléculas de isocianato pode ter uma média de 1,5 a 12 grupos de isocianato por molécula de isocianato; alternativamente, uma média de 1,5 a 9 grupos isocianato por molécula de isocianato; alternativamente, uma média de 2 a 7 grupos isocianato por 30 molécula de isocianato; alternativamente, uma média de 2 a

5 grupos isocianato por molécula de isocianato; ou
alternativamente, uma média de 2 a 4 grupos isocianato por
molécula de isocianato. Em personificações, a composição
de isocianato pode compreender isocianatos alifáticos,
5 isocianatos cicloalifáticos, isocianatos aromáticos, ou
suas misturas. Em algumas personificações, a composição de
isocianato compreende isocianatos alifáticos;
alternativamente, isocianatos cicloalifáticos; ou
alternativamente, isocianatos aromáticos.

10 Em personificações, os isocianatos alifáticos da
composição podem compreender etileno diisocianato, 1,3-
trimetileno diisocianato, 1,4-tetrametileno diisocianato,
1,6-hexametileno diisocianato, 1,7-heptametileno
isocianato, 1,8-octametileno diisocianato, 1,9-nonametileno
15 diisocianato, 1,10-decametillene diisocianato, 1,11-
undecametileno diisocianato, 1,12-dodecametileno
diisocyanato, 2,2'- dimetilpentano diisocianato, 2,2,4-
trimetil-1,6-hexametileno diisocianato, 2,4,4-
trimetilhexametileno diisocianato, 1,6,11-undecano
20 triisocianato, 1,3,6-hexametileno triisocianate, 1,8-
diisocianato-4-(isocianatometil)octano, 2,5,7-trimetil-1,8-
diisocianato-5-(isocianatometil)octano, ou qualquer de suas
combinações. Em algumas personificações, os isocianatos
alifáticos da composição de isocianato podem compreender
25 etileno diisocianato, 1,3-trimetileno diisocianato, 1,4-
tetrametileno diisocianato, 1,6-hexametileno diisocianato,
1,12-dodecametileno diisocianato, 2,2,4-trimetil-1,6-
hexametileno diisocianato, 2,4,4-trimetilhexametileno
diisocianato, 1,6,11-undecano triisocianate, 1,3,6-
30 hexametileno triisocianato, ou qualquer uma de suas

combinações. Em outras personificações, os isocianatos alifáticos da composição de isocianato podem compreender 1-4-tetrametileno diisocianato, 1,6-hexametileno diisocianato, ou qualquer de suas combinações. Em ainda
 5 outras personificações, o isocianato alifático da composição de isocianato compreende o 1,6-hexametileno diisocianato.

Em personificações, os isocianatos cicloalifáticos da composição de isocianato podem compreender 1-isocianato-2-
 10 isocianatometil ciclopentano, 1,3-ciclohexano diisocianato, 1,4-ciclohexano diisociianato, 2,4-metilciclohexano diisocianato, 2,6-metilciclohexano diisocianato, 1,2-dimetilciclohexano diisocianato, 1,4-dimetilciclohexano diisocianato, isoforona diisocianato (IPDI), 1-isocianato-
 15 1-metil-4(3)-isocianatometil ciclohexano, 1,3-bis-(isocianato-metil) ciclohexano, 1,4-bis(isocianato-metil) ciclohexano, 2,4'-diciclohexilmetano diisocianato, 4,4'-diciclohexilmetano diisocianato (MDI, HMDI hidrogenado), 2,2'-dimetildiciclohexilmetano diisocianato, 4,4'-bis(3-
 20 metilciclohexil)metano diisocianato, ou qualquer de suas combinações. Em algumas personificações, os isocianatos alifáticos cíclicos da composição de isocianato podem compreender 1,3-ciclohexano diisocianato, 1,4-ciclohexano diisocianato, 2,4-metilciclohexano diisocianato, 2,6-
 25 metilciclohexano diisocianato, 1,2-dimetilciclohexano diisocianato, 1,4-dimetilciclohexano diisocianato, isoforona diisocianato, 2,4'-diciclohexilmetano diisocianato, 4,4'-diciclohexilmetano diisocianato, ou qualquer de suas combinações. Em outras personificações, o
 30 isocianato alifático cíclico da composição de isocianato

compreende 1,3-ciclohexano diisocianato; alternativamente, 1,4-ciclohexano diisocianato; alternativamente, 2,4-metilciclohexano diisocianato; alternativamente, 2,6-metilciclohexano diisocianato; alternativamente, isoforona
 5 diisocianato; alternativamente, 2,4'-diciclohexilmetano diisocianato; or alternativamente, 4,4'-diciclohexilmetano diisocianato.

Em personificações, os isocianatos aromáticos da composição de isocianato podem compreender 1,3-fenileno
 10 diisocianato, 1,4-fenileno diisocianato, 2,4-tolileno diisocianato (TDI), 2,5-tolueno diisocianato, 2,6-tolileno diisocianato, tolileno- α ,4-diisocianato, 1,3-xilileno diisocianato, 1,4-xililene diisocianato, dietilfenileno diisocianato, diisopropilfenileno diisocianato,
 15 trimetilbenzeno triisocianato, $\alpha,\alpha,\alpha',\alpha'$ -tetrametil-1,3-xililene diisocianato, $\alpha,\alpha,\alpha',\alpha'$ -tetrametil-1,4-xililene diisocianato, mesitileno triisocianato, benzeno triisocianato, 1,5-diisocianato naftaleno, metilnaftaleno diisocianato, bis(isocianatometil)naftaleno, bifenil
 20 diisocianato, 2,4'-difenilmetano diisocianato, 4,4'-difenilmetano diisocianato (MDI), polimérico 4,4'-difenilmetano diisocianato (polimérico MDI, PMDI), 3,3'-dimetil-difenilmetano-4,4'-diisocianato, bibenzil-4,4'-diisocianato, bis(isocianatofenil)etileno, trifenilmetano
 25 triisocianato, bis(isocyanatoetil)benzene, bis-(isocyanatopropil)benzene, bis(isocianatobutil) benzeno, naftaleno triisocianato, difenilmetano-2,4,4'-triisocianato, 3-metildifenilmetano-4,6,4'-triisocianato, 4-metildifenil-metano-3,5,2',4',6'-pentaaisocianato, tetra-
 30 hidronaftileno diisocianato, ou qualquer uma de suas

combinações. Em algumas personificações, os isocianatos aromáticos da composição de isocianato podem compreender 1,3-fenileno diisocianato, 1,4-fenileno diisocianato, 2,4-tolileno diisocianato, 2,6-tolileno diisocianato, 1,3-xilileno diisocianato, 1,4-xilileno diisocianato, trimetilbenzeno triisocianato, benzeno triisocianato, bifenil diisocianato, 2,4'-difenilmetano diisocianato, 4,4'-difenilmetano diisocianato, polimérico 4,4'-difenilmetano diisocianato, 3,3'-dimetil-difenilmetano-4,4'-diisocianato, bibenzil-4,4'-diisocianato, trifenilmetano triisocianato, polimérico MDI, naftaleno triisocianato, ou qualquer de suas combinações. Em algumas personificações, os isocianatos alifáticos da composição de isocianato compreendem 1,3-fenileno diisocianato, 1,4-fenileno diisocianato, 2,4-tolileno diisocianato, 2,6-tolileno diisocianato, 1,3-xilileno diisocianato, 1,4-xilileno diisocianato, 2,4'-difenilmetano diisocianato, 4,4'-difenilmetano diisocianato, polimérico 4,4'-difenilmetano diisocianato, 3,3'-dimetil-difenilmetano-4,4'-diisocianato, polimérico 4,4'-difenilmetano diisocianato, 3,3'-dimetil-difenilmetano-4,4'-diisocianato, polimérico 4,4'-difenilmetano diisocianato, ou qualquer de suas combinações. Em ainda outras personificações, os isocianatos alifáticos da composição de isocianato compreendem 2,4-tolileno diisocianato; alternativamente, 2,6-tolileno diisocianato; alternativamente, 2,4- e 2,6-tolileno diisocianato; alternativamente, 4,4'-difenilmetano diisocianato; alternativamente, polimérico 4,4'-difenilmetano diisocianato; ou alternativamente, misturas de 2,4'-difenilmetano diisocianato e 4,4'-difenilmetano

diisocianato.

EXEMPLOS

EXEMPLO 1 - PREPARAÇÃO DE UMA COMPOSIÇÃO DE PRÉ-POLÍMERO DE TIOURETANO E SUBSEQÜENTE FORMAÇÃO DE UM POLÍMERO DE

5

TIOURETANO

Amostras foram preparadas de uma composição de pré-polímero de tiouretano baseada em óleo de soja mercaptanizado, que quando curada pode ser útil como adesivo. A Tabela 1 fornece os parâmetros que foram usados para preparar as amostras de pré-polímero de tiouretano e as propriedades adesivas do polímero de tiouretano curado produzido dos pré-polímeros de tiouretanos. 0,05 wt. % DBLT (dibutiltin dilaurato) foi usado como catalisador em algumas das amostras. Em outras amostras. 0.5 wt. % DMEE (dimorfolinodietiléter) foi usado como catalisador. Uma vez que as composições de pré-polímero de tiouretano foram preparadas, as variáveis da resposta para os pré-polímeros de tiouretanos foram observadas (viscosidade aparente inicial e a 5 dias). Os pré-polímeros de tiouretano foram então curados em umidade e a adesão da composição de polímero de tiouretano resultante para vários substratos foi medida. Ao medir a adesão da composição do polímero de tiouretano curado, uma escala de 1-5 foi usada. Nesta escala, 5 = excelente, 4 = muito bom, 3 = bom, 2 = satisfatório, e 1 = fraco. Os resultados das observações das variáveis de resposta estão descritos no Exemplo 2.

Tabela 1		
Constantes	Variáveis de Controle	Variáveis de Resposta

	Variável	Níveis	Resposta	Unidades
Funcionalidade de MSO ~2.6 [8.6 wt. % enxofre mercaptano]	wt. % PPG na mistura	10% 20% 30% 40%	Thiourethane Prepolymer Initial Apparent Viscosity	cP (@ 65°C)
Tipo de oligômero diol = polipropileno glicol (PPG), Mn ~1000	Índice NCO (taxa mol. dos grupos NCO:XH)	3.5 3.0 2.5 2.0	Pré-Polímero de Tiouretano Em 5 Dias de Viscosidade Aparente	cP (@ 65°C)
Tipo de isocianato = MDI não modificado, E.W. = 125.125	Tipo de catalisador	DBTDL, DMDEE	Adesão do Polímero de Tiouretano Curado a vários substratos (madeira, CRS, Al, concreto)	1 - 5
Condições de reação = 80°C 30 min., 80°C sob vácuo a 30 min.				

EXEMPLO 2 - OBSERVAÇÕES DE VARIÁVEIS DE RESPOSTA DO EXEMPLO

1

Oito amostras diferentes de 350 gramas de composição

de pré-polímero de tiouretano foram preparadas usando óleo de soja mercaptanizado, MDI, e propileno glicol possuindo um Mn~1000 de acordo com os parâmetros mostrados na Tabela 1. Cada amostra da composição de pré-polímero de tiouretano foi aplicada a uma placa 4" x 4" e foi permitida a curar por uma noite (por cura úmida). A adesão relativa de cada composição de polímero de tiouretano ao substrato ao qual foi aplicado foi avaliada para determinar quão bem o material aderido ao substrato de acordo com o Padrão ASTM D3808. Cada composição de pré-polímero foi aplicada ao substrato desejado usando-se uma seringa de 60 cc em um tamanho de gota de aproximadamente 2 cm de diâmetro. Os substratos incluíram blocos de concreto, placas de aço de rolamento a frio Q-Panel®, placas de alumínio Q-Panel®, e tábuas de carvalho. As composições de pré-polímeros foram permitidas a curar (para produzir uma composição de polímero de tiouretano) em condições ambientes por 24 horas, após as quais as gotas curadas foram anexadas usando uma espátula de aço inoxidável de lâmina fina para examinar a facilidade relativa de separação e tipo de falha de cada composição de pré-polímero curado dos substratos. Uma escala relativa de adesão de 1-5 foi usada para comparar as composições de pré-polímeros curadas, com 5 = excelente, 4 = muito bom, 3 = bom, 2 = satisfatório, e 1 = fraco. Os resultados são mostrados na Tabela 2.

Tabela 2								
Nº da Amostra	1	2	3	4	5	6	7	8
MSO (g)	131.1	130.5	114.0	113.5	98.4	98.0	84.9	84.5
MSO wt. %	37.5	37.3	32.6	32.4	28.1	28.0	24.2	24.1
Olig. Wt. %	10	10	20	20	30	30	40	40

Tabela 2								
N° da Amostra	1	2	3	4	5	6	7	8
Olig. Wt. (g)	35.0	34.8	70.0	69.7	104.9	104.5	139.9	139.3
MDI (g)	183.8	182.9	165.9	165.1	146.4	145.8	125.0	124.5
NCO/SH+OH taxa molar	3.5	3.5	3.0	3.0	2.5	2.5	2.0	2.0
OH:SH taxa molar	0.2	0.2	0.4	0.4	0.8	0.8	1.2	1.2
Cat.	DBTDL	DMDEE	DBTDL	DMDEE	DBTDL	DMDEE	DBTDL	DMDEE
Cat. Wt. (g)	0.175	1.750	0.175	1.750	0.175	1.750	0.175	1.750
Cat. Nível (wt. %)	0.05	0.50	0.05	0.50	0.05	0.50	0.05	0.50
Wt. % NCO	11.8	10.1	10.3	9.3	7.8	7.5	6.0	5.3
Teórico % NCO	12.6	12.5	10.6	10.6	8.4	8.4	6.0	6.0
Visc. Inicial (cP)	3400	2793	3840	4495	7650	6570	8860	7600
Adesão Relativa à Madeira	5	5	5	5	5	5	5	5
Adesão Relativa ao CRS	4	4	4	4	5	5	5	5
Adesão Relativa ao Alumínio	4	4	4	4	5	4	5	4
Adesão Relativa ao Concreto	4	4	4	4	5	5	5	5

EXEMPLO 3 - PREPARAÇÃO DE COMPOSIÇÕES DE POLÍMERO DE
TIOURETANO PREPARADAS A PARTIR DE COMPOSIÇÕES DE PRÉ-
POLÍMERO DE TIOURETANO DE ÍNDICE DE ISOCIANATO 2.0

Amostras de polímeros de tiouretano foram preparadas
 5 usando as composições de pré-polímero de tiouretano
 possuindo um índice de isocianato de 2.0 usando as
 constantes e variáveis de controle contidas na Tabela 3. As
 variáveis de resposta das composições de polímero de
 tiouretano foram observadas quando as variáveis de controle
 10 do pré-polímero de tiouretano foram modificadas. Os
 resultados das observações estão descritos no Exemplo 4.

Tabela 3				
Constantes	Variáveis de Controle		Variáveis de Resposta do Polímero de Tiouretano	
	Variable	Levels	Resposta	Unidades
Fôrma- Fôrmas de Teflon	Tipo de Selante	MSOPPG-DBTDL - 2.0 MSOPPG-DMDEE - 2.0 Bostik® GPS 1 Bostik® 915	Rigidez de Apoio A (ASTM D 2240)	#
Perfil de Curagem - R.T., 50 % RH, 14 dias			Módulo Tênsil @ 25 % alongamento (ASTM D412)	6,89 kPa
			Módulo Tênsil @ 50 % Alongamento (ASTM D412)	6,89 kPa
			Módulo Tênsil @ Quebra (ASTM D412)	6,89 kPa

Tabela 3				
Constantes	Variáveis de Controle		Variáveis de Resposta do Polímero de Tiouretano	
	Variable	Levels	Resposta	Unidades
			Alongamento @ quebra (ASTM D412)	%

EXEMPLO 4 - OBSERVAÇÕES DE VARIÁVEIS DE RESPOSTA DO EXEMPLO

3

Amostras de polímeros de tiouretano foram preparadas usando um isocianato de índice 2.0 (taxa de NCO: grupos SH +OH e uma taxa molar OH:SH de 1,2:1) de pré-polímero de tiouretano de acordo com as variáveis listadas na Tabela 3 e foram comparadas com as amostras preparadas usando selantes comercialmente disponíveis marca Bostik. A rigidez de apoio A, módulo a 25% de alongamento, módulo a 50% de alongamento, força tênsil, e alongamento das amostras de polímero de tiouretano preparadas de acordo com personificações da presente invenção e das amostras de controle preparadas usando adesivos Bostik® estão localizadas na Tabela 4.

Tabela 4						
Eta pa	Tipo de Selante	Rigidez de Apoio A	Módulo @ % 25 (6,89 kPa)	Módulo @ 50% (6,89 kPa)	Força Tênsil (6,89 kPa)	Alonga- mento (%)
1	MSO-PPG-DBTDL-2.0	47.0	760	580	383.8	75.9
2	MSO-PPG-DBTDL-2.0	51.3	1160	840	697.7	96.1
3	MSO-PPG-DBTDL-2.0	43.7	840	600	528.0	93.3
4	MSO-PPG-DBTDL-2.0	58.7	780	570	287.8	50.8
5	MSO-PPG-DBTDL-2.0	58.3	740	540	419.0	84.7

Tabela 4						
Eta pa	Tipo de Selante	Rigidez de Apoio A	Módulo @ % 25 (6,89 kPa)	Módulo @ 50% (6,89 kPa)	Força Tênsil (6,89 kPa)	Alonga- mento (%)
6	MSO-PPG-DMDEE-2.0	30.0	480	390	294.8	85.3
7	MSO-PPG-DMDEE-2.0	27.0	396	310	227.6	85.7
8	MSO-PPG-DMDEE-2.0	31.7	352	290	204.7	87.3
9	MSO-PPG-DMDEE-2.0	36.0	392	320	209.3	73.5
10	MSO-PPG-DMDEE-2.0	44.0	460	370	226.5	64.7
11	Bostik® GPS1	25.8	168	120	89.6	437.6
12	Bostik® GPS1	22.2	160	98	74.0	422.8
13	Bostik® GPS1	28.1	188	112	84.4	423.8
14	Bostik® GPS1	29.7	168	102	76.8	410.0
15	Bostik® GPS1	25.7	156	98	73.1	423.2
16	Bostik® 915	15.8	112	84	69.9	413.0
17	Bostik® 915	19.8	108	84	66.2	387.9
18	Bostik® 915	21.1	112	82	72.7	408.2
19	Bostik® 915	20.0	112	80	68.3	435.5

EXEMPLO 5 - ÍNDICE VARIANTE DE ISOCIANATO EM COMPOSIÇÕES DE
PRÉ-POLÍMERO DE TIOURETANO

Várias composições de pré-polímero de tiouretano foram preparadas possuindo um índice de isocianato que variou de 4,0 a 6,0. A viscosidade aparente inicial e a viscosidade aparente após cinco dias foram medidas, os resultados dos quais estão mostrados na Tabela 5. Nas etapas 1, 2, 3 e 8, as viscosidades inicial e no quinto dia foram medidas a 100°F (38°C). Nas etapas 4, 6, 9, 13 e 17, as viscosidades inicial e no quinto dia foram medidas a 120°F (49°C). Na etapa 5, a viscosidade inicial aparente foi medida a 100°F (38°C) e a viscosidade aparente no quinto dia foi medida a

120°F (49°C). Na etapa 7, a viscosidade inicial aparente foi medida a 120°F (49°C) e a viscosidade aparente no quinto dia foi medida a 140°F (60°C). Na etapa 16, as viscosidades inicial e no quinto dia foram medidas a 140°F (60°C).

5

Tabela 5										
Etapa	MSO (g)	MDI (g)	NCO/SH taxa molar	Catali- sador	Cat. wt. (g)	Cat. Nível (wt. %)	Wt. % NCO	Teor. % NCO	Visc. Ini- cial (cP)	5 Dias Visc. (cP)
1	117.0	232.8	6.0	DMDEE	0.175	0.05%	18.3%	18.6%	664	2049
2	116.5	231.8	6.0	DMDEE	1.750	0.50%	17.4%	18.5%	1984	2742
3	131.3	217.7	5.0	DBTDL	0.980	0.28%	15.8%	16.7%	6360	9050
4	150.3	199.5	4.0	DBTDL	0.175	0.05%	13.8%	14.4%	6240	6280
5	131.0	217.3	5.0	DMDEE	1.750	0.50%	15.6%	16.7%	7600	4080
6	131.6	218.2	5.0	DMDEE	0.175	0.05%	16.1%	16.8%	1143	1405
7	150.0	199.0	4.0	DBTDL	0.980	0.28%	13.6%	14.3%	8990	7920
8	117.0	232.8	6.0	DBTDL	0.175	0.05%	17.2%	18.6%	2445	1716
9	116.5	231.8	6.0	DBTDL	1.750	0.50%	17.0%	18.5%	1860	4065
10	149.7	198.6	4.0	DMDEE	1.750	0.50%	13.2%	14.3%	8480	7940
11	150.0	199.0	4.0	DMDEE	0.980	0.28%		14.3%		
12	131.6	218.2	5.0	DBTDL	0.175	0.05%		16.8%		
13	150.3	199.5	4.0	DMDEE	0.175	0.05%	13.7%	14.4%	4000	4760
14	116.7	232.3	6.0	DMDEE	0.980	0.28%		18.6%		
15	116.7	232.3	6.0	DBTDL	0.980	0.28%		18.6%		
16	149.7	198.6	4.0	DBTDL	1.750	0.50%	13.4%	14.3%	7150	> 10,000 *

Tabela 5										
Etapa	MSO (g)	MDI (g)	NCO/SH taxa molar	Catali- sador	Cat. wt. (g)	Cat. Nível (wt. %)	Wt. % NCO	Teor. % NCO	Visc. Ini- cial (cP)	5 Dias Visc. (cP)
17	131.3	217.7	5.0	DMDEE	0.980	0.28%	15.6%	16.7%	1816	1972
18	131.0	217.3	5.0	DBTDL	1.750	0.50%		16.7%		

*A leitura excedeu o limite superior do viscosímetro de Brookfield®.

EXEMPLO 6 - COMPOSIÇÕES DE PRÉ-POLÍMERO DE TIOURETANO
POSSUINDO UM ÍNDICE DE ISOCIANATO DE 4.0

5 Seis amostras de composições de pré-polímero de tiouretano foram preparadas usando um índice de isocianato de 4.0. A viscosidade aparente inicial das amostras de pré-polímero de tiouretano foi medida e é mostrada na Tabela 6.

Tabela 6								
Etapa	MSO (g)	MDI (g)	Catali- sador	Cat. Wt. (g)	Cat. Nível (wt. %)	wt. % NCO	Teórico % NCO	Viscosidade Inicial Aparente (cP)
1	298.7	401.0	DBTDL	0.35	0.05%	13.7%	14.4%	1816
2	298.7	401.0	DBTDL	0.35	0.05%	13.7%	14.4%	1846
3	298.7	401.0	DBTDL	0.35	0.05%	13.6%	14.4%	2463
4	297.3	399.2	DMDEE	3.50	0.50%	13.5%	14.4%	2808
5	297.3	399.2	DMDEE	3.50	0.50%	13.5%	14.4%	2901
6	297.3	399.2	DMDEE	3.50	0.50%	13.4%	14.4%	2943

APLICAÇÕES

Além dos usos aqui descritos, personificações da presente invenção são úteis em outras numerosas aplicações.

Por exemplo, personificações da invenção são úteis em várias aplicações de polímeros que incluem, mas não se limitam, tiouretanos, espumas, adesivos, e selantes. Acredita-se que as composições aqui descritas também possam
5 ser usadas como agentes de enrijecimento do epóxi, poliacrilatos, e moldes de polimetacrilato para tintas e resinas de poliéster, polímeros de ligantes de tintas para impressão, ligadores cruzados de resina alquida, moldes para tintas de base de enxofre, polímeros curados por
10 radiação, químicos para mineração e perfuração, especialmente agentes de transferência de cadeias, modificadores de borrachas, e similares. Devido aos materiais das matérias primas serem econômicos e prontamente disponíveis, acredita-se que personificações da
15 presente invenção seriam úteis em tais aplicações e similares.

Enquanto esta invenção tem sido descrita com referência a personificações ilustrativas e exemplos, a descrição não pretende ser construída em um sentido
20 limitado. Assim, várias modificações das personificações ilustrativas, assim como outras personificações da invenção, serão aparentes a pessoas habilitadas na tecnologia após referência a esta descrição. Portanto, contempla-se que as reivindicações em anexo cobrirão
25 quaisquer modificações ou personificações.

Todas as publicações, patentes e aplicações de patentes aqui referidas são incorporadas por referência em sua totalidade na mesma extensão como se cada publicação individual, patente ou aplicação de patente fosse
30 especificamente e individualmente indicada para ser

incorporada por referência em sua totalidade.

REIVINDICAÇÕES

1. Composição de pré-polímero de tiouretano caracterizado por compreender um produto de reação de uma mistura compreendendo:

5 a. uma composição de éster de tiol compreendendo uma média de pelo menos dois grupos de tiol por molécula de éster de tiol;

b. uma composição de isocianato compreendendo uma média de pelo menos dois grupos isocianato por molécula
10 de isocianato; e

c. um catalisador;

onde a composição de éster de tiol e a composição de isocianato possuem uma taxa equivalente NCO:XH maior que 2,1:1, e onde NCO representa os grupos isocianato usados
15 para produzir a composição de pré-polímero de tiouretano e XH representa grupos de hidrogênio ativo usados para produzir a composição de pré-polímero de tiouretano, os grupos de hidrogênio ativo sendo selecionados a partir do grupo consistindo dos grupos tiol, grupos álcool, grupos
20 amina, grupos amida, grupos ácido carboxílico, e suas combinações.

2. Composição, de acordo com a reivindicação 1, caracterizada pelo fato de que a composição do éster de tiol compreende um óleo insaturado mercaptanizado de fonte
25 natural, um óleo mercaptanizado epoxidizado de fonte natural, um óleo de ligação cruzada mercaptanizada de fonte natural, ou suas combinações.

3. Composição, de acordo com a reivindicação 1, caracterizada pelo fato de que a composição do éster de tiol compreende um óleo de soja mercaptanizado, um óleo de
30

soja mercaptanizado epoxidizado, um óleo de soja de ligação cruzada mercaptanizada, ou suas combinações.

4. Composição, de acordo com a reivindicação 1, caracterizada pelo fato de que o catalisador compreende um catalisador de estanho, um catalisador de amina, um catalisador de bismuto, um catalisador de ferro, ou suas combinações.

5. Composição, de acordo com a reivindicação 1, caracterizada pelo fato de que compreende ainda um solvente.

6. Composição, de acordo com a reivindicação 5, caracterizada pelo fato de que o solvente é metil etil cetona, carbonato de glicerol, acetona, hexeno, destilado de petróleo, butil acetato, tolueno, benzeno, ou suas combinações.

7. Composição, de acordo com a reivindicação 1, caracterizada pelo fato de que compreende ainda um agente modificador de propriedade.

8. Composição, de acordo com a reivindicação 7, caracterizada pelo fato de que o agente modificador de propriedade compreende um polipropileno glicol.

9. Composição, de acordo com a reivindicação 1, caracterizada pelo fato de que a taxa de equivalência NCO:XH varia de 2,1:1 a 10:1.

10. Composição, de acordo com a reivindicação 1, caracterizada pelo fato de que possui uma viscosidade aparente que varia de 2500 centipoises a 10000 centipoises a uma temperatura de 120°F (49°C).

11. Composição de polímero de tiouretano caracterizada por compreender um produto de reação de

curagem de uma mistura compreendendo uma composição de éster de tiol, uma composição de isocianato, e um catalisador, a composição de polímero de tiouretano possuindo um força de curagem total em substrato carvalho-carvalho por ASTM D1002 em uma variação de 300 psi (2068 kPa) a 1500 psi (10340 kPa).

12. Composição de polímero de tiouretano, de acordo com a reivindicação 11, caracterizada pelo fato de que a composição do éster de tiol compreende um óleo insaturado mercaptanizado de fonte natural, um óleo mercaptanizado epoxidizado de fonte natural, um óleo de ligação cruzada mercaptanizada de fonte natural, ou suas combinações.

13. Composição do polímero de tiouretano, de acordo com a reivindicação 11, caracterizada pelo fato de que a composição do éster de tiol compreende um óleo de soja mercaptanizado, um óleo de soja mercaptanizado epoxidizado, um óleo de soja de ligação cruzada mercaptanizada, ou suas combinações.

14. Composição do polímero de tiouretano, de acordo com a reivindicação 11, caracterizada pelo fato de que possui um valor de alongamento médio que varia de 50% a 100%.

15. Composição de polímero de tiouretano, de acordo com a reivindicação 11, caracterizada pelo fato de que possui um resultado de teste de mobilidade articular que varia entre -45% e 45%.

16. Composição de polímero de tiouretano, de acordo com a reivindicação 11, caracterizada pelo fato de que possui um valor de rigidez de apoio A médio variando de

25 a 60.

17. Composição de polímero de tiouretano, de acordo com a reivindicação 11, caracterizada pelo fato de que possui um módulo médio a 25% de alongamento variando de
5 350 psi (2413 kPa) a 1175 psi (8101 kPa).

18. Composição de polímero de tiouretano, de acordo com a reivindicação 11, caracterizada pelo fato de que possui um módulo médio a 50% de alongamento variando de 250 psi (1724 kPa) a 850 psi (5861 kPa).

10 19. Composição de polímero de tiouretano, de acordo com a reivindicação 11, caracterizada pelo fato de que possui uma força tênsil média variando de 200 psi (1379 kPa) a 700 psi (4826 kPa).

20. Método de preparação de composição de
15 polímero de tiouretano caracterizado por compreender as etapas de:

a. contactar uma composição de éster de tiol compreendendo uma média de pelo menos dois grupos tiol por molécula de tioéster, uma composição de isocianato
20 compreendendo uma média de pelo menos dois grupos isocianatos por molécula de isocianato, e um catalisador para formar uma composição de pré-polímero de tiouretano, a composição do éster de tiol e a composição de isocianato possuindo uma taxa de equivalência NCO:XH maior do que
25 2:1,1, onde NCO representa os grupos isocianato usados para produzir a composição de pré-polímero de tiouretano, os grupos de hidrogênio ativo sendo selecionados do grupo consistindo dos grupos tiol, grupos álcool, grupos amina, grupos amida, grupos ácido carboxílico, e suas combinações;

30 e

b. curagem da composição de pré-polímero de tiouretano para produzir a composição do polímero de tiouretano possuindo uma força total de curagem em substrato carvalho-carvalho por ASTM D1002 em uma variação
5 de 300 psi (2068 kPa) a 1500 psi (10340 kPa).

21. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que a composição do éster de tiol compreende um óleo insaturado mercaptanizado de fonte natural, um óleo mercaptanizado epoxidizado de fonte
10 natural, um óleo de ligação cruzada mercaptanizada de fonte natural, ou suas combinações.

22. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que a composição do éster de tiol compreende um óleo de soja mercaptanizado, um óleo de
15 soja mercaptanizado epoxidizado, um óleo de soja de ligação cruzada mercaptanizada, ou suas combinações.

23. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que o catalisador compreende um catalisador de estanho, um catalisador de amina, um
20 catalisador de bismuto, um catalisador de ferro, ou suas combinações.

24. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que a taxa de equivalência NCO:XH varia de 2,1:1 a 10:1.

25. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que o contato da composição do éster de tiol, a composição de isocianato, e o catalisador ainda compreende contato com um agente modificador de
propriedade.

26. Método, de acordo com a reivindicação 25,

caracterizado pelo fato de que o agente modificador de propriedade compreende um polipropileno glicol.

27. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que o contato da composição do éster de tiol, a composição de isocianato, e o catalisador ainda compreende contato com um solvente.

28. Método, de acordo com a reivindicação 27, caracterizado pelo fato de que o solvente é metil etil cetona, carbonato de glicerol, acetona, hexeno, destilado de petróleo, butil acetato, tolueno, benzeno, ou suas combinações.

29. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que a composição do polímero de tiouretano possui um valor de alongamento médio que varia de 50% a 100%.

30. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que a composição de polímero de tiouretano possui um resultado de teste de mobilidade articular que varia entre -45% e 45%.

31. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que a composição de polímero de tiouretano possui um valor de rigidez de apoio A médio variando de 25 a 60.

32. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que a composição de polímero de tiouretano possui um módulo médio a 25% de alongamento variando de 350 psi (2413 kPa) a 1175 psi (8101 kPa).

33. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que a composição de polímero de tiouretano possui um módulo médio a 50% de alongamento

variando de 250 psi (1724 kPa) a 850 psi (5861 kPa).

34. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que a composição de polímero de tiouretano possui uma força tênsil média variando de 200
5 psi (1379 kPa) a 700 psi (4826 kPa).

35. Método, de acordo com a reivindicação 20, caracterizado pelo fato de que a curagem da composição de pré-polímero de tiouretano inclui usar um sistema de curagem multi-componente onde a composição de pré-polímero
10 de tiouretano entra em contato com um agente de hidrogênio ativo e opcionalmente um segundo catalisador.

RESUMO**COMPOSIÇÕES DE TIOURETANO E PROCESSOS PARA FABRICAÇÃO E USO
DO MESMO**

Composições de pré-polímeros de tiouretano,
composições de polímero de tiouretano, métodos de
fabricação de composições, e métodos de uso das composições
de polímero de tiouretano são fornecidos. A composição de
polímero de tiouretano pode ser produzida por contato de
uma composição de éster de tiol e uma composição de
10 isocianato para produzir uma composição de pré-polímero e
então curar a composição de pré-polímero para produzir a
composição de polímero de tiouretano. A composição do pré-
polímero também pode incluir um agente modificador de
propriedade. Em algumas personificações, as composições de
15 éster de tiol incluem ésteres de tiol, ésteres de hidroxí
tiol, e ésteres de tiol de ligação cruzada.