



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

(21) **PI0710717-0 A2**

(22) Data de Depósito: 21/09/2007
(43) Data da Publicação: 23/08/2011
(RPI 2120)



(51) *Int.Cl.:*
C08G 18/10 2006.01
C08G 18/75 2006.01
C08G 18/50 2006.01

(54) Título: **COMPOSIÇÃO DE EXTENSORES DE CADEIA, PROCESSO DE PRODUÇÃO DE POLÍMEROS UTILIZANDO OS DITOS EXTENSORES DE CADEIA E POLÍMEROS ASSIM OBTIDOS**

(30) Prioridade Unionista: 25/09/2006 US 11/534,980

(73) Titular(es): Albemarle Corporation

(72) Inventor(es): David W. Owens, John Y. Lee, Judit Orgad, Paul L. Wiggins

(74) Procurador(es): Araripe & Associados

(86) Pedido Internacional: PCT US2007079170 de 21/09/2007

(87) Publicação Internacional: WO 2008/039699 de 03/04/2008

(57) Resumo: COMPOSIÇÃO DE EXTENSORES DE CADEIA, PROCESSO DE PRODUÇÃO DE POLÍMEROS UTILIZANDO OS DITOS EXTENSORES DE CADEIA E POLÍMEROS ASSIM OBTIDOS. Esta invenção fornece composições de extensor de cadeia. Estas composições compreendem (i) uma diamina alifática secundária e (ii) um componente selecionado do grupo que consiste de: (a) uma diamina ciclo-alifática primária; (b) uma diamina alifática secundária; (c) uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária; (d) uma diimina alifática; e (e) uma combinação de qualquer dois ou mais de (a) a (d), com a condição de que quando (ii) é (a), (i) uma diamina alifática secundária não cíclica. Processos de produção de poliuretanos, poliuréias e poliuréias-uretanos também são fornecidos.



PI0710717-0

“COMPOSIÇÃO DE EXTENSORES DE CADEIA, PROCESSO DE PRODUÇÃO DE POLÍMEROS UTILIZANDO OS DITOS EXTENSORES DE CADEIA E POLÍMEROS ASSIM OBTIDOS”

Campo Técnico

5 Esta invenção se refere ao uso de diaminas alifáticas para formar poliuretanos, poliuréias e poliuréia-uretanos.

Fundamentos

Existem muitos compostos multifuncionais, incluindo dióis e diaminas aromáticas, que são indicados por serem úteis como extensores de cadeia na preparação de poliuretano, poliuréia, e polímeros de poliuretano-uréia e/ou como agentes de cura para resinas epóxi. Nenhum desses compostos apresenta uma reatividade tal que o torne universalmente ideal, e muitos falham em fornecer propriedades satisfatórias aos produtos feitos com estes. Assim, há ainda uma necessidade em encontrar compostos capazes de servir tanto como extensores de cadeia quanto como agentes de cura. A patente US No. 10
15 4806616 ensina o uso de algumas N,N'-dialquilfenilenodiaminas como extensores de cadeia na preparação de poliuretanos e poliuréias. Do mesmo modo, veja também, por exemplo, a patente US 4528363, que ensina o uso de diaminas alifáticas secundárias como parte de um ligante de resina, e US 6218480 B1, que revela o uso de diaminas aromáticas como endurecedores de poliuretanos. Diaminas aromáticas secundárias
20 também têm sido usadas como anti-degradantes de borracha, ver US 4900868.

Há uma crescente necessidade por extensores de cadeia com velocidades de cura mais lentas, tal que isto seria outra vantagem se diaminas alifáticas exibissem velocidades de cura mais lentas do que aquelas dos extensores de cadeia presentemente disponíveis.

25 **Resumo da Invenção**

Esta invenção em parte fornece extensores de cadeia que são misturas de diaminas alifáticas secundárias e um ou mais outros componentes. Estas misturas, quando incluídas em formulações de poliuretanos, poliuréias e poliuréias-uretanos, produzem tais polímeros nas velocidades de cura desejadas e apresentam propriedades
30 físicas desejáveis.

Uma realização desta invenção fornece uma composição de extensor de cadeia. A composição compreende (i) uma diamina alifática secundária e (ii) um outro componente. O componente é selecionado do grupo que consiste de:

- (a) uma diamina ciclo-alifática primária;
- 5 (b) uma diamina alifática secundária;
- (c) uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária;
- (d) uma diimina alifática; e
- (e) uma combinação de qualquer dois ou mais de (a) a (d),

com a condição de que quando (ii) é (a), (i) é uma diamina alifática secundária não
10 cíclica.

Uma outra realização desta invenção é um processo de produção de um polímero que é um poliuretano, poliuréia e poliuréia-uretano. O processo compreende misturar (A) pelo menos um poliisocianato alifático, (B) pelo menos um poliol e/ou pelo menos um polieteramina, e (C) um extensor de cadeia que compreende (i) uma diamina
15 alifática secundária e (ii) um outro componente. O componente é selecionado do grupo que consiste de:

- (a) uma diamina ciclo-alifática primária;
- (b) uma diamina alifática secundária;
- (c) uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária;
- 20 (d) uma diimina alifática; e
- (e) uma combinação de qualquer dois ou mais de (a) a (d),

com a condição de que quando (ii) é (a), (i) é uma diamina alifática secundária não cíclica.

Ainda uma outra realização desta invenção é um polímero que é um
25 poliuretano, poliuréia e poliuréia-uretano, cujo polímero é formado a partir dos ingredientes que compreendem (A) pelo menos um poliisocianato alifático, (B) pelo menos um poliol e/ou pelo menos um polieteramina, e (C) um extensor de cadeia que compreende (i) uma diamina alifática secundária e (ii) um outro componente. O componente é selecionado do grupo que consiste de:

- 30(a) uma diamina ciclo-alifática primária;

- (b) uma diamina alifática secundária;
- (c) uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária;
- (d) uma diimina alifática; e
- (e) uma combinação de qualquer dois ou mais de (a) a (d),

5 com a condição de que quando (ii) é (a), (i) é uma diamina alifática secundária não cíclica.

Estas e outras realizações e características desta invenção ficarão ainda mais aparentes a partir da descrição seguinte e das reivindicações anexas.

Descrição Mais Detalhada da Invenção

10 Composições de Extensor de cadeia da Invenção

As composições de extensor de cadeia desta invenção são feitos com uma diamina alifática secundária e um ou mais de outros componentes selecionados de (a) pelo menos uma diamina ciclo-alifática primária; (b) pelo menos uma diamina alifática secundária; (c) uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária; e
 15 (d) uma diimina alifática. Componentes preferidos para uso com diamina alifática secundária são as diaminas ciclo-alifáticas primárias. Os componentes podem estar presentes na composição de extensor de cadeia numa variedade de proporções; as razões preferidas variam com o tipo de componente de (ii).

I. Componente (i)

20 Diaminas alifáticas secundárias são componentes (i) das composições de extensor de cadeia da invenção. As diaminas alifáticas secundárias são diaminas hidrocarbíl secundárias onde a porção hidrocarbíl da diamina é alifática, onde a “porção hidrocarbíl” se refere a porção a qual os grupos amino são ligados. A porção hidrocarbíl da diamina alifática pode ser cíclica, ramificada ou preferivelmente, de cadeia
 25 linear. Os grupos hidrocarbíl amino da diamina alifática secundária podem ser cíclicos, ramificados ou de cadeia linear. Preferivelmente, os grupos hidrocarbíl amino são de cadeia linear ou, mais preferivelmente, grupos alquil de cadeia ramificada que possui de 3 a cerca de 12 átomos de carbono. Exemplos de grupos hidrocarbíl amino adequados incluem etil, propil, isopropil, n-butil, sec-butil, t-butil, pentil, ciclopentil, hexil,
 30 metilciclohexil, heptil, octil, ciclooctil, nonil, decil, e dodecil, e similares.

Preferivelmente, a diamina alifática secundária apresenta de cerca de 8 a cerca de 40 átomos de carbono, mais preferivelmente, a diamina alifática secundária possui de cerca de 10 a cerca de 30 átomos de carbono. Particularmente, as diaminas alifáticas secundárias preferidas apresentam porções hidrocarbônicas de cadeia cíclica ou linear e possuem de cerca de 12 a cerca de 25 átomos de carbono.

Diaminas alifáticas secundárias que podem ser usadas nesta invenção incluem, mas não se limitam a, N,N'-diisopropiletenodiamina, N,N'-di-sec-butil-1,2-diaminopropano, N,N'-di(2-butenil)-1,3-diaminopropano, N,N'-di(1-ciclopropiletil)-1,5-diaminopentano, N,N'-di(3,3-dimetil-2-butil)-1,5-diamino-2-metilpentano, N,N'-di-sec-butil-1,6-diaminohexano, N,N'-di(3-pentil)-2,5-dimetil-2,5-hexanodiamina, N,N'-di(4-hexil)-1,2-diaminociclohexano, N,N'-diciclohexil-1,3-diaminociclohexano, N,N'-di(1-ciclobutiletil)-1,4-diaminociclohexano, N,N'-di(2,4-dimetil-3-pentil)-1,3-ciclohexanobis(metilamina), N,N'-di(1-penteno-3-il)-1,4-ciclohexanobis(metilamina), N,N'-diisopropil-1,7-diaminoheptano, N,N'-di-sec-butil-1,8-diaminooctano, N,N'-di(2-pentil)-1,10-diaminodecano, N,N'-di(3-hexil)-1,12-diaminododecano, N,N'-di(3-metil-2-ciclohexenil)-1,2-diaminopropano, N,N'-di(2,5-dimetilciclopentil)-1,4-diaminobutano, N,N'-di(isofoiril)-1,5-diaminopentano, N,N'-di(mentil)-2,5-dimetil-2,5-hexanodiamina, N,N'-di(undecil)-1,2-diaminociclohexano, N,N'-di-2-(4-metilpentil)-isoforonodiamina e N,N'-di(5-nonil)-isoforonodiamina. Uma diamina alifática secundária preferida é N,N'-di(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano.

II. Componente (ii)

(f) O componente (ii) é selecionado do grupo que consiste de (a) uma diamina ciclo-alifática primária; (b) uma diamina alifática secundária; (c) uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária; (d) uma diimina alifática; e (e) uma combinação de qualquer dois ou mais de (a) a (d), com a condição de que quando (ii) é (a), (i) é uma diamina alifática secundária não cíclica. Assim, misturas de sub-componentes (a)-(d) em várias combinações estão dentro do escopo desta invenção.

Sub-componente (a)

Diaminas ciclo-alifáticas primárias são sub-componentes (a) do componente (ii). Quando o componente (ii) é uma diamina ciclo-alifática primária, a

diamina alifática secundária do componente (i) é uma diamina alifática secundária não cíclica. Diaminas alifáticas secundárias não cíclicas são diaminas alifáticas secundárias como descritas acima em que os dois grupos aminos não estão ligados a um grupo cicloalifático ou via um substituinte de um grupo cicloalifático. Uma diamina

5 alifática secundária não cíclica preferida é N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano.

As diaminas ciclo-alifáticas primárias usadas nesta invenção são diaminas hidrocarbônicas primárias em que os dois grupos amino estão ligados a um grupo cicloalifático. O grupo cicloalifático pode ser um anel simples, anéis fundidos, anéis bicíclicos, ou um sistema tri-cíclico (cujo sistema tri-cíclico pode conter anéis fundidos e/ou anéis bi-cíclicos). Anéis simples são preferidos. Os grupos amino podem ser ligados diretamente ao anel, ou um ou ambos os grupos amino podem ser ligados a um grupo que é um substituinte do anel. Prefere-se que pelo menos um dos grupos amino seja ligado ao anel. Preferivelmente, a diamina ciclo-alifática secundária possui de cerca de 6 a cerca

10 de 40 átomos de carbono; mais preferivelmente, a diamina alifática secundária possui de cerca de 10 a cerca de 25 átomos de carbono. As proporções relativas de diamina alifática secundária para diamina ciclo-alifática primária na composição do extensor de cadeia são preferencialmente de cerca de 10:1 a cerca de 1:1 com base no peso; mais preferivelmente, as proporções relativas com base no peso são de cerca de 5:1 a cerca de

15 1:1. Mesmo mais preferidas são as proporções relativas com base no peso de cerca de 3:1 a cerca de 1:1.

Diaminas ciclo-alifáticas primárias que são adequadas à prática desta invenção incluem, mas não estão limitadas a, 1,2-diaminociclohexano, 1,3-diaminociclohexano, 1,4-diaminociclohexano, 2,4-dietil-6-metil-1,3-ciclohexanodamina,

25 4,6-dietil-2-metil-1,3-ciclohexanodamina, 1,4-ciclohexanobis(metilamina), isoforona diamina, bis(p-aminociclohexil)metano, bis(3-metil-4-aminociclohexil)metano, 1,8-diamino-p-metano, e 3(4),8(9)-bis-(aminometil)-tríciclo[5.2.1.0(2,6)]decano (TCD diamina; também chamada octahidro-4,7-metanoindeno-1(2), 5(6)-dimetanoamina ou octahidro-4,7-metano-1H-indenodimetil-amina). Diaminas ciclo-alifáticas primárias

30 preferidas incluem isoforona diamina.

Uma composição de extensor de cadeia preferida, quando o componente (ii) é uma diamina ciclo-alifática primária em que o grupo ciclo-alifático possui um anel simples, e/ou pelo menos um dos grupos amino está diretamente ligado a um anel da diamina ciclo-alifática primária, possui proporções relativas de (i) para (ii) com base no peso de cerca de 5:1 a cerca de 1:1.

Sub-componente (b)

Diaminas alifáticas secundárias são sub-componentes (b) do componente (ii), e diaminas alifáticas secundárias adequadas como sub-componente (c) e preferências são deste modo, como acima descrito para o componente (i). As diaminas ciclo-alifáticas secundárias podem estar em qualquer proporção relativa adequada uma em relação a outra.

Quando (ii) é uma diamina alifática secundária, uma composição de extensor de cadeia preferida nesta invenção é uma em que uma das diaminas alifáticas secundárias é N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano.

Sub-componente (c)

Uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária são sub-componentes (c) de (ii). A diamina alifática secundária e a diamina alifática primária podem estar em qualquer proporção relativa adequada uma em relação a outra, e suas quantidades totais combinadas podem estar em qualquer proporção relativa à diamina aromática primária de (i). Preferivelmente, a proporção da quantidade total combinada de diamina alifática secundária e diamina alifática primária relativa à diamina aromática primária de (i) está na faixa de cerca de 0,5:1 a cerca de 1:0,5.

Diaminas alifáticas secundárias adequadas como sub-componente (c) e preferências são deste modo, como descritas acima para o componente (i). Quando a diamina alifática primária do sub-componente (c) é uma diamina ciclo-alifática primária, compostos adequados e preferências são como descritos acima para o componente (a). Quando a diamina alifática primária do sub-componente (c) é uma diamina alifática primária não cíclica, que pode ser ramificada ou, preferivelmente, de cadeia linear. Preferivelmente, a diamina alifática primária possui de cerca de 4 a cerca de 30 átomos de carbono; mais preferivelmente, a diamina alifática primária possui de

cerca de 4 a cerca de 30 átomos de carbono; mais preferivelmente, a diamina alifática primária possui de cerca de 6 a cerca de 20 átomos de carbono.

Exemplos de diaminas alifáticas primárias não cíclicas que podem ser usadas como parte do sub-componente (c) incluem, mas não se limitam a, etilenodiamina, 1,2-diaminopropano, 1,3-diaminopropano, 1,4-diaminobutano, 1,5-diaminopentano, 1,5-diamino-2-metilpentano, 1,6-diaminohexano, 2,5-dimetil-2,5-hexanodiamina, 1,7-diaminoheptano, 1,8-diaminooctano, 1,10-diaminodecano, e 1,12-diaminododecano.

Quando (ii) é uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária, uma composição de extensor de cadeia preferida nesta invenção é uma em que uma das diaminas alifáticas secundárias é N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano.

Sub-componente (d)

Diiminas alifáticas (diiminas são também chamadas diquetiminas) são sub-componentes (d) do componente (ii). Processos para formar diiminas a partir de diaminas primárias são providas nos co-pendentes pedidos de patente US No. 11/390777, depositada em 27/03/2006 e pedido de patente PCT No. PCT/US2005/47696, depositado em 30/12/2005 de mesmo requerente. Outras revelações de métodos para produção de diiminas incluem WO 97/01529, e patente US No. 4855500 e US No. 4536518.

Quando (ii) é uma diamina alifática secundária, uma composição de extensor de cadeia preferida nesta invenção é uma em que uma das diaminas alifáticas secundárias é N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano.

A porção hidrocarbíl da diimina alifática pode ser o grupo hidrocarbíl de cadeia cíclica, ramificada ou linear, onde "porção hidrocarbíl" se refere a porção a qual os grupos imino estão ligados. Preferivelmente, a diimina alifática possui de 6 a cerca de 40 átomos de carbono, mais preferivelmente, a diimina alifática possui de cerca de 10 a cerca de 30 átomos de carbono. Os grupos hidrocarbílido dos grupos imino da diimina alifática geralmente possuem de 1 a 20 átomos de carbono; os grupos hidrocarbílido são grupos alquilideno de cadeia linear ou ramificada que possuem de 3 a cerca de 6 átomos de carbono. Exemplos de grupos alquilideno de cadeia linear ou ramificada que

possuem de 3 a cerca de 6 átomos de carbono. Exemplos de grupos imino hidrocarbílido adequados incluem etilídeno, propilídeno, isopropilídeno, 1-ciclopropilídeno, n-butilídeno, sec-butilídeno, ciclobutilídeno, 2-etilbutilídeno, 3,3-dimetil-2-butilídeno, 3-pentilídeno, 3-penteno-2-ilídeno, ciclopentilídeno, 2,5-dimetilciclopentilídeno, 2-ciclopentilídeno, hexilídeno, metilciclohexilídeno, mentilídeno, ionilídeno, forilídeno, isoforilídeno, heptilídeno, 2,6-dimetil-3-heptilídeno, ciclooctilídeno, 5-nonilídeno, decilídeno, e 10-undecenilídeno, e similares.

Diiminas alifáticas que podem ser usadas nesta invenção incluem, mas não se limitam a, N,N'-diisopropilídeno-etilenodiamina, N,N'-di-sec-butilídeno-1,2-diaminopropano, N,N'-di(2-butilídeno)-1,3-diaminopropano, N,N'-di(1-ciclopropiletilídeno)-1,5-diaminopentano, N,N'-di(3,3-dimetil-2-butilídeno)-1,5-diamino-2-metilpentano, N,N'-di-sec-butilídeno-1,6-diaminohexano, N,N'-di(3-pentilídeno)-2,5-dimetil-2,5-hexanodiamina, N,N'-di(4-hexilídeno)-1,2-diaminociclohexano, N,N'-diciclohexilídeno-1,3-diaminociclohexano, N,N'-di(1-ciclobutiletilídeno)-1,4-diaminociclohexano, N,N'-di(2,4-dimetil-3-pentilídeno)-1,3-ciclohexanobis(metilamina), N,N'-di(1-penteno-3-ilídeno)-1,4-ciclohexanobis(metilamina), N,N'-diisopropilídeno-1,7-diaminoheptano, N,N'-di-sec-butilídeno-1,8-diaminooctano, N,N'-di(2-pentilídeno)-1,10-diaminododecano, N,N'-di(3-hexilídeno)-1,12-diaminododecano, N,N'-di(3-metil-2-ciclohexenilídeno)-1,2-diaminopropano, N,N'-di(2,5-dimetilciclopentilídeno)-1,4-diaminobutano, N,N'-di(isofoirilídeno)-1,5-diaminopentano, N,N'-di(mentilídeno)-2,5-dimetil-2,5-hexanodiamina, N,N'-di(undecilídeno)-1,2-diaminociclohexano, N,N'-di(2-(4-metilpentilídeno)-isofoironadiazina e N,N'-di(5-nonilídeno)-isofoironadiazina.

Processos da Invenção

Nos processos da invenção, um polímero que é um poliuretano, poliuréia ou poliuréia-uretano é obtido pela mistura de pelo menos um poliisocianato alifático, pelo menos um poliol e/ou pelo menos um polietaramina, e uma composição de extensor de cadeia da invenção. Como é bem conhecido no estado da arte, outros componentes também podem ser incluídos quando a produção de poliuretano, poliuréia ou poliuréia-uretano, tais como um ou mais retardadores de chama, estabilizadores térmicos, e/ou surfactantes. Em alguns processos da invenção, o poliol ou polietaramina, composição de

extensor de cadeia, e quando usado, ingredientes opcionais, são mistuados para formar uma primeira mistura, seguido pela mistura desta primeira mistura com o isocianato para formar uma segunda mistura; esta segunda mistura é deixada curar. Em outros processos desta invenção, o isocianato e o polioli ou polieteramina são misturados para formar um

5 pré-polímero, cujo pré-polímero é então misturado com a composição do extensor de cadeia para formar o polímero desejado. Ainda em outros processos da invenção, o isocianato é misturado com polioli ou polieteramina para formar um pseudo-pré-polímero; polioli ou polieteramina é misturado com a composição de extensor de cadeia para formar uma mistura; e então a mistura é misturada com o pseudo-pré-polímero para formar o

10 polímero desejado. Assim, a composição de extensor de cadeia é reagida com um poliisocianato e pelo menos um polioli e/ou polieteramina. Na prática desta invenção, o uso de pseudo-pré-polímeros é o modo preferido de produção de poliuréias.

Os poliisocianatos alifáticos são poliisocianatos orgânicos que possuem pelo menos dois grupos isocianatos. Geralmente, os isocianatos possuem um teor de -

15 NCO livre de pelo menos cerca de 0,1% em peso. Poliisocianatos alifáticos que podem ser usados na prática desta invenção incluem diisocianato de isoforona (DIIF), diisocianato de ciclohexileno, diisocianato de 4,4'-metileno diciclohexil (H12MDI); diisocianatos de aralquil mistos incluindo diisocianato de tetrametilxilil; e isocianatos de polimetileno que incluem diisocianato de 1,4-tetrametileno, diisocianato de 1,5-pentametileno, diisocianato

20 de 1,6-hexametileno (DIHM), diisocianato de 1,7-heptametileno, diisocianato de 2,2,4- e 2,4,4-trimetilhexametileno, diisocianato de 1,10-decametileno e diisocianato de 2-metil-1,5-pentametileno. Um poliisocianato alifático preferido é diisocianato de isoforona (DIIF). Exemplos de isocianatos que podem ser usados são também ensinados, por exemplo, no documento US 4595742.

25 Polióis e polieteraminas isocianatos-reativos (algumas vezes referidos como polióis amino-terminados) que são tipicamente usados na produção de poliuretanos, poliuréias e poliuréias-uretanos com peso molecular na faixa de cerca de 60 até mais de 6.000. Os polióis podem ser polióis diídricos, triídricos, ou poliídricos, mas são freqüentemente diídricos. Exemplos de polióis adequados incluem poli(etilenoxi) glicóis,

30 dipropileno glicol, poli(propilenoxi) glicóis, dibutileno glicóis, dipropileno glicóis,

poli(propilenoxi) glicóis, dibutileno glicol, poli(butilenoxi) glicóis, e glicol polimérico de caprolactona, comumente conhecido como policaprolactona. As polieteraminas usadas para produzi poliuretanos, poliuréias e poliuréias-uretanos são poliís amino-protegidos que são o produto de reação de um poliol e então uma amina com óxidos de alquilenos bem como poliésteres contendo hidroxilas amino-protegidos. Polieteraminas tipicamente possuem um peso molecular de cerca de 200 a cerca de 6000. Várias polieteraminas comercialmente disponíveis conhecidas como Jeffamines® disponibilizadas pela Huntsman Chemical Company e incluem Jeffamine® T-5000, um óxido de polipropileno triamina de cerca de 5000 de peso molecular, XTJ-509, um óxido de polipropileno triamina de cerca de 3000 de peso molecular, XTJ-510, um óxido de polipropileno diamina de cerca de 4000 de peso molecular, e Jeffamine® D-2000, um óxido de polipropileno diamina de cerca de 2000 de peso molecular. Jeffamine® T-5000 e Jeffamine® D-2000 são polieteraminas preferidas na prática de esta invenção.

Num processo preferido da invenção, o componente (i) da composição de extensor de cadeia é N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano. Num outro processo preferido da invenção, o componente (i) da composição de extensor de cadeia é diamina isoforona.

Polímeros Formados pela Invenção

Os polímeros formados pela invenção são poliuretanos, poliuréias e poliuréias-uretanos (algumas vezes chamados poliuréias-poliuretanos). Devido a seus diferentes tempos de gelificação (velocidades de cura), estes polímeros podem ser usados em diferentes aplicações. Poliuretanos, poliuréias e poliuréias-uretanos feitos com as composições de extensor de cadeia da invenção apresentam tempos de gelificação mais desejáveis, e, no mínimo, as propriedades físicas dos polímeros não são adversamente afetadas pelo uso das composições de extensor de cadeia da invenção. De fato, um polímero mais resistente é obtido quando feito a partir das composições de extensor de cadeia da invenção em comparação com os polímeros feitos com os extensores de cadeia individuais.

Um polímero preferido formado por esta invenção é formado a partir de uma composição de extensor de cadeia da invenção em que o componente (i) é uma

diamina alifática secundária que é N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano, ou é formado a partir de uma composição de extensor de cadeia em que o componente (ii) é diamina isoforona.

Um outro polímero preferido formado por esta invenção é formado a partir de diisocianato de isoforona, pelo menos um polieteramina, e uma composição de extensor de cadeia em que o componente (i) é uma diamina alifática secundária em que a porção hidrocarbônica da diamina é uma cadeia linear, e/ou possui grupos amino hidrocarbônicos que são grupos alquila de cadeia linear ou ramificada, e/ou é uma diamina alifática secundária que apresenta cerca de 10 a cerca de 30 átomos de carbono, e em que o componente (ii) é uma diamina ciclo-alifática primária em que o grupo ciclo-alifático possui um anel simples e/ou um dos grupos amino está ligado diretamente ao anel.

O exemplo seguinte é apresentado com o propósito de ilustração, e não é pretendido para impor limitações ao escopo desta invenção.

No exemplo seguinte, o isocianato foi diisocianato de isoforona (DIIF). Jeffamine® D-200 (um polieteramina, da Huntsman Chemical) foi usado para produzir as poliuréias. A diamina alifática secundária foi N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano. Uma pistola dispensadora pneumática (DP-400-85-1, da Mixpac Systems AG, Switzerland) foi usada em conjunto com um misturador estático. O misturador estático foi tanto um misturador hidráulico em espiral de plástico com 30 elementos e um diâmetro interno de 0,37 polegadas (0,94 cm) (EA 370-30, da Ellsworth Adhesives) ou um misturador hidráulico de plástico com 48 elementos e um diâmetro interno de 0,25 polegadas (0,635 cm) (Statomix® MS 06-48).

Exemplo 1

Formulações de poliuréia contendo isocianato, Jeffamine® D-200, uma diamina alifática secundária, e uma diamina ciclo-alifática primária foram preparadas. O isocianato foi misturado com uma porção do Jeffamine® D-200 para formar um pseudo-pré-polímero. O restante do Jeffamine® D-200 foi misturado com o(s) extensores de cadeia para formar uma mistura. Esta mistura foi então adicionada a um compartimento da pistola de mistura pneumática; o pseudo-pré-polímero foi adicionado a outro compartimento. A mistura e o pseudo-pré-polímero foram misturados (reagidos)

- empurrando-os através de um misturador estático sobre uma placa de aço e curada a temperatura ambiente. Uma poliuréia foi preparada sem uma diamina ciclo-alifática primária com objetivo comparativo. As quantidades relativas dos extensores de cadeia, um em relação ao outro (em peso) estão listadas na tabela 1. Os polímeros curados foram submetidos a teste. As propriedades das poliuréias estão resumidas na tabela 1.

Tabela 1

	Comparativo	Corrida 1	Corrida 2
N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butyl)-1,6-diaminohexano	47,1	34,9	28,3
Isoforona diamina	-	6,2	9,3
Tempo de gelificação (velocidade de cura)	305 seg.	162 seg.	86 seg.
Dureza Shore D, 0 seg.	49	48	48
Dureza Shore D, 10 seg.	45	44	43
Resistência à tração	2480 psi [17099 KPa]	2270 psi [15652 KPa]	2340 psi [16134 KPa]
Elongação	510%	380%	390%
Módulo (100%)	1100 psi [7584 KPa]	1230 psi [8481 KPa]	1310 psi [9032 KPa]
Módulo (300%)	1540 psi [10618 KPa]	1890 psi [13031 KPa]	2110 psi [14548 KPa]
Resistência à ruptura	520 pli [91 kN/m]	550 pli [96 kN/m]	550 pli [96 kN/m]

- Deve-se compreender que os reagentes e componentes referidos pelo nome químico ou fórmula em qualquer parte deste documento, se referidos no singular ou plural, são identificados como aqueles existentes antes de entrar em contato com uma outra substância referida pelo nome químico ou tipo químico (por exemplo, um outro reagente, um solvente, ou etc.). Não importa que mudanças, transformações e/ou reações químicas preliminares, se alguma, ocorre na mistura resultante ou solução ou meio de

reação uma vez que tais mudanças, transformações e/ou reações são o resultado natural do contato entre os reagentes e/ou componentes especificados, sob as condições exigidas de acordo com esta revelação. Assim, os reagentes e componentes são identificados como ingredientes a serem postos juntos em conexão com a realização de uma operação ou
5 reação química desejada ou na formação de uma mistura a ser utilizada na condução de uma operação ou reação desejada. Também, embora, uma realização possa se referir a substâncias, componentes e/ou ingredientes no tempo presente (“é compreendido de”, “compreende”, “é”, etc.), a referência é à substância, componente ou ingrediente conforme existente no momento justamente antes de seu primeiro contato, mistura ou
10 associação com um ou mais de outras substâncias, componentes e/ou ingredientes de acordo com a presente revelação.

Também, embora, a permissão se refira a substâncias no tempo presente (por exemplo, “compreende”, “é”, etc.), a referência é à substância conforme esta existia no momento justamente antes de seu primeiro contato, mistura ou associação com
15 uma ou mais de outras substâncias de acordo com a presente revelação.

Exceto, se de outro modo, expressamente indicado, o artigo “um” ou “uma” se e conforme aqui usado não é pretendido para limitar, e não deve ser interpretado como limitante, a uma descrição ou a um único elemento ao qual o artigo se refere. Mais do que isso, o artigo “um” ou “uma” se e conforme aqui usado é pretendido
20 abranger um ou mais de tais elementos, a menos que de outro modo expressamente indicado no texto.

Esta invenção é suscetível de considerável variação na sua prática.

REIVINDICAÇÕES

1. Composição de extensor de cadeia **CARACTERIZADA** por compreender:

- (i) uma diamina alifática secundária, e
- (ii) um componente selecionado do grupo que consiste de:
 - (a) uma diamina ciclo-alifática primária;
 - (b) uma diamina alifática secundária;
 - (c) uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária;
 - (d) uma diimina alifática; e
 - (e) uma combinação de qualquer dois ou mais de (a) a (d),

com a condição de que quando (ii) é (a), (i) é uma diamina alifática secundária não cíclica.

2. Composição de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADA** por

(i) apresentar pelo menos uma das seguintes características:

- a porção hidrocarbíl da diamina é uma cadeia linear;
- os grupos amino hidrocarbíl são grupos alquil de cadeia linear ou ramificada;
- a diamina alifática secundária apresenta cerca de 10 a cerca de 30 átomos de carbono.

3. Composição de acordo com a reivindicação 1 **CARACTERIZADA** pela dita diamina alifática secundária ser N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano.

4. Composição de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADA** pelo fato de que (ii) é uma diamina ciclo-alifática primária que possui pelo menos uma das seguintes características:

- o grupo ciclo-alifático possuir um anel simples;
- pelo menos um dos grupos amino estar diretamente ligado a um anel.

5. Composição de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADA** pelo fato de que a dita diamina ciclo-alifática primária é isoforona diamina.

6. Composição de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADA** pelo fato de que (i) é N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano, e (ii) é isoforona

diamina.

7. Composição de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADA** pelo fato de que (ii) é uma diamina alifática secundária, e que pelo menos uma das ditas diaminas alifáticas secundárias apresenta pelo menos uma das seguintes características:

- 5 - a porção hidrocarbíl da diamina é uma cadeia linear;
- os grupos amino hidrocarbíl são grupos alquil de cadeia linear ou ramificada;
- a diamina alifática secundária apresenta cerca de 10 a cerca de 30 átomos de carbono.

10 8. Composição de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADA** pelo fato de que (ii) é uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária.

15 9. Composição de acordo com a reivindicação 8, **CARACTERIZADA** por pelo menos uma das ditas diaminas alifáticas secundárias apresentar uma das seguintes características:

- a porção hidrocarbíl da diamina é uma cadeia linear;
- os grupos amino hidrocarbíl são grupos alquil de cadeia linear ou ramificada;
- 20 - a diamina alifática secundária apresenta cerca de 10 a cerca de 30 átomos de carbono.

10. Composição de acordo com a reivindicação 8, **CARACTERIZADA** pela dita diamina alifática primária ser uma diamina alifática primária não cíclica que apresenta pelo menos uma das seguintes características:

- a porção hidrocarbíl da diamina é uma cadeia linear;
- 25 - a diamina alifática primária apresenta cerca de 6 a cerca de 20 átomos de carbono.

11. Composição de acordo com a reivindicação 8, **CARACTERIZADA** pela dita diamina alifática primária ser uma diamina ciclo-alifática primária que apresenta pelo menos uma das seguintes características:

- 30 - o grupo ciclo-alifático possuir um anel simples;

- um dos grupos amino estar diretamente ligado a um anel.

12. Composição de acordo com a reivindicação 1, **CARACTERIZADA** pelo fato de que (ii) é uma diimina alifática, e os grupos imino hidrocarbílido da dita diimina alifática apresentar pelo menos uma das seguintes características:

- serem grupos alquilídeos de cadeia ramificada;
- terem de 3 a 6 átomos de carbono.

13. Processo produção de um polímero que compreende misturar (A) pelo menos um poliisocianato alifático, (B) pelo menos um poliol e/ou pelo menos um polieteramina, e (C) um extensor de cadeia, **CARACTERIZADO** pelo dito extensor de cadeia compreender:

- (i) uma diamina alifática secundária, e
- (ii) um componente selecionado do grupo que consiste de:
 - (a) uma diamina ciclo-alifática primária;
 - (b) uma diamina alifática secundária;
 - (c) uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária;
 - (d) uma diimina alifática; e
 - (e) uma combinação de qualquer dois ou mais de (a) a (d),

com a condição de que quando (ii) é (a), (i) é uma diamina alifática secundária não cíclica.

14. Processo de acordo com a reivindicação 13, **CARACTERIZADO** pelo dito poliisocianato ser diisocianato de isoforona.

15. Processo de acordo com a reivindicação 13, **CARACTERIZADO** pelo fato de que (B) é pelo menos um polieteramina.

16. Processo de acordo com a reivindicação 13, **CARACTERIZADO** pelo poliisocianato ser diisocianato de isoforona, e (B) ser pelo menos um polieteramina.

17. Processo de acordo com a reivindicação 13, **CARACTERIZADO** pelo fato de que (i) apresenta pelo menos uma das seguintes características:

- a porção hidrocarbílido da diamina é uma cadeia linear;
- os grupos amino hidrocarbílido são grupos alquil de cadeia linear ou ramificada;

- a diamina alifática secundária apresenta cerca de 10 a cerca de 30 átomos de carbono.

18. Processo de acordo com a reivindicação 13, **CHARACTERIZADO** pelo fato de que (ii) é uma diamina ciclo-alifática primária que apresenta pelo menos uma das seguintes características:

- o grupo ciclo-alifático possuir um anel simples;
- um dos grupos amino estar diretamente ligado a um anel.

19. Processo de acordo com a reivindicação 13, **CHARACTERIZADO** pelo fato de que (i) é N,N'-di-(3,3-dimetil-2-but il)-1,6-diaminohexano e que (ii) é diamina isoforona.

20. Processo de acordo com a reivindicação 13, **CHARACTERIZADO** pelo fato de que (i) apresenta pelo menos uma das seguintes características:

- a porção hidrocarbíl da diamina é uma cadeia linear;
- os grupos amino hidrocarbíl são grupos alquil de cadeia linear ou

ramificada;

- a diamina alifática secundária apresenta cerca de 10 a cerca de 30 átomos de carbono, e (ii) é uma diamina ciclo-alifática primária que apresenta pelo menos uma das seguintes características:

- o grupo ciclo-alifático possuir um anel simples;
- um dos grupos amino estar diretamente ligado a um anel.

21. Processo de acordo com a reivindicação 20, **CHARACTERIZADO** pelo dito poliisocianato ser diisocianato de isoforona, e (B) ser pelo menos um polieteramina.

22. Processo de acordo com a reivindicação 13, **CHARACTERIZADO** pelo fato de que um pseudo-pré-polímero é formado durante o processo.

23. Processo de acordo com a reivindicação 13, **CHARACTERIZADO** pelo fato de que um pré-polímero é formado durante o processo.

24. Polímero formado a partir de ingredientes que compreendem (A) pelo menos um poliisocianato alifático, (B) pelo menos um poliol e/ou pelo menos um polieteramina, e (C) um extensor de cadeia, **CHARACTERIZADO** pelo dito extensor de cadeia compreender:

- (i) uma diamina alifática secundária, e
- (ii) um componente selecionado do grupo que consiste de:
 - (a) uma diamina ciclo-alifática primária;
 - (b) uma diamina alifática secundária;
 - (c) uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária;
 - (d) uma diimina alifática; e
 - (e) uma combinação de qualquer dois ou mais de (a) a (d),

com a condição de que quando (ii) é (a), (i) é uma diamina alifática secundária não cíclica.

25. Polímero de acordo com a reivindicação 24, **CARACTERIZADO** pelo dito poliisocianato ser diisocianato de isoforona.

26. Polímero de acordo com a reivindicação 24, **CARACTERIZADO** pelo fato de que (B) é pelo menos um polieteramina.

27. Polímero de acordo com a reivindicação 24, **CARACTERIZADO** pelo dito poliisocianato ser diisocianato de isoforona, e (B) ser pelo menos uma polieteramina.

28. Polímero de acordo com a reivindicação 24, **CARACTERIZADO** pelo fato de que (i) apresenta pelo menos uma das seguintes características:

- a porção hidrocarbíl da diamina é uma cadeia linear;
- os grupos amino hidrocarbíl são grupos alquil de cadeia linear ou ramificada;
- a diamina alifática secundária apresenta cerca de 10 a cerca de 30 átomos de carbono.

29. Polímero de acordo com a reivindicação 24, **CARACTERIZADO** pelo fato de que (ii) é uma diamina ciclo-alifática primária que apresenta pelo menos uma das seguintes características:

- o grupo ciclo-alifático possuir um anel simples;
- um dos grupos amino estar diretamente ligado a um anel.

30. Polímero de acordo com a reivindicação 24, **CARACTERIZADO** pelo fato de que (i) é N,N'-di-(3,3-dimetil-2-butil)-1,6-diaminohexano e (ii) é isoforona

diamina.

31. Polímero de acordo com a reivindicação 24, **CARACTERIZADO** pelo fato de que (i) apresenta pelo menos uma das seguintes características:

- a porção hidrocarbíl da diamina é uma cadeia linear;

5 - os grupos amino hidrocarbíl são grupos alquil de cadeia linear ou ramificada;

- a diamina alifática secundária apresenta cerca de 10 a cerca de 30 átomos de carbono, e (ii) é uma diamina ciclo-alifática primária que apresenta pelo menos uma das seguintes características:

10 - o grupo ciclo-alifático possuir um anel simples;

- um dos grupos amino estar diretamente ligado a um anel.

RESUMO**“COMPOSIÇÃO DE EXTENSORES DE CADEIA, PROCESSO DE PRODUÇÃO DE POLÍMEROS UTILIZANDO OS DITOS EXTENSORES DE CADEIA E POLÍMEROS ASSIM OBTIDOS”**

5 Esta invenção fornece composições de extensor de cadeia. Estas composições compreendem (i) uma diamina alifática secundária e (ii) um componente selecionado do grupo que consiste de: (a) uma diamina ciclo-alifática primária; (b) uma diamina alifática secundária; (c) uma diamina alifática secundária e uma diamina alifática primária; (d) uma diimina alifática; e (e) uma combinação de qualquer dois ou
10 mais de (a) a (d), com a condição de que quando (ii) é (a), (i) é uma diamina alifática secundária não cíclica. Processos de produção de poliuretanos, poliuréias e poliuréias-uretanos também são fornecidos.