



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2020년05월14일

(11) 등록번호 10-2110746

(24) 등록일자 2020년05월08일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09J 175/04 (2006.01) **C08L 75/04** (2006.01)
- (21) 출원번호 10-2014-7032074
- (22) 출원일자(국제) 2013년04월16일
 심사청구일자 2018년04월16일
- (85) 번역문제출일자 2014년11월14일
- (65) 공개번호 10-2015-0002832
- (43) 공개일자 2015년01월07일
- (86) 국제출원번호 PCT/US2013/036751
- (87) 국제공개번호 WO 2013/158621
 국제공개일자 2013년10월24일
- (30) 우선권주장
 61/625,065 2012년04월16일 미국(US)
 61/683,277 2012년08월15일 미국(US)
- (56) 선행기술조사문헌
 KR1020110053652 A*
 WO2011138274 A1*
 WO2012004209 A1*
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌

- (73) 특허권자
 사우디 아람코 테크놀로지스 컴퍼니
 사우디 아라비아 다란 31311 사서함 62
- (72) 발명자
 앨런 스콧 디.
 미국 뉴욕주 14850 이타카 스위트 198 덴비 로드
 950 노보머 인코포레이티드
 샌디아레빅 바히드
 미국 뉴욕주 14850 이타카 스위트 198 덴비 로드
 950 노보머 인코포레이티드
 오코너 제임스
 미국 뉴욕주 14850 이타카 스위트 198 덴비 로드
 950 노보머 인코포레이티드
- (74) 대리인
 장훈

전체 청구항 수 : 총 33 항

심사관 : 이지민

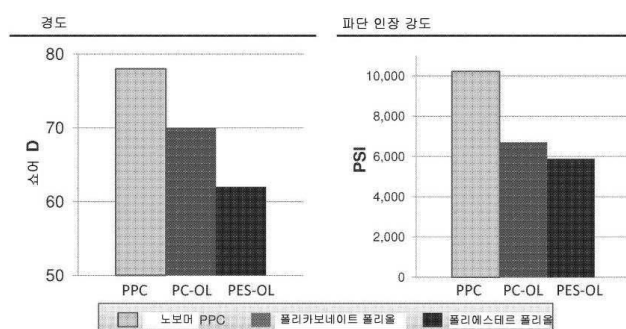
(54) 발명의 명칭 접착제 조성물 및 방법

(57) 요약

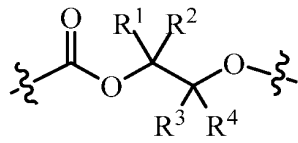
본 발명은 지방족 폴리카보네이트 쇄를 포함하는 폴리우레탄 접착제 조성물을 포함한다. 하나의 국면에서, 본 발 (뒷면에 계속)

대표도

TPU에서 PPC의 초기 평가는 매우 고강도 및 인장 강도를 나타냈다



명은 지방족 폴리카보네이트 폴리올 및 폴리이소시아네이트로부터 유도된 폴리우레탄 접착제를 포함하고, 상기 폴리올 쇄가 다음 구조를 갖는 1차 반복 단위를 함유한다:



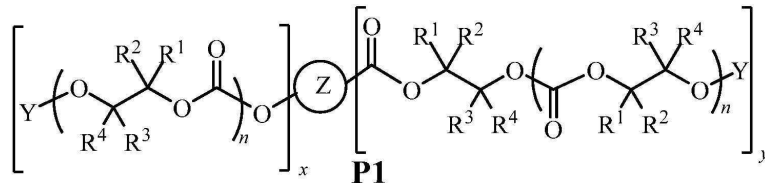
또 하나의 국면에서, 본 발명은 본 발명의 폴리우레탄 조성물을 포함하는 제품뿐만 아니라 이러한 조성물의 제조방법을 제공한다.

명세서

청구범위

청구항 1

구조 P1을 갖는 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올로부터 유도된 단편들을 포함하는 반응성 폴리우레탄 접착제 제형:



여기서, R^1 , R^2 , R^3 및 R^4 는 각각의 발생(occurrence)에서, -H, 불소, 임의로 치환된 C_{1-40} 지방족 그룹, 임의로 치환된 C_{1-20} 헤테로지방족 그룹 및 임의로 치환된 아릴 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되고,

여기서 R^1 , R^2 , R^3 및 R^4 중의 어느 둘 이상은 임의로, 개재(intervening) 원자들과 함께, 임의로 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성할 수 있고;

Y는 각각의 발생에서 독립적으로 -H, 반응성 그룹, 또는 쇠 연장성 잔기에 대한 부착 부위이고;

Z 는 다가 잔기(moiety)이고;

x 및 y는 각각 독립적으로 0 내지 6의 정수이고, 여기서 x 및 y의 합은 2 내지 6이고;

n은 각각의 발생에서 독립적으로 3 내지 1,000의 정수이고;

여기서, 상기 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올에서 카보네이트 결합(carbonate linkage)의 비율이 95% 이상이고;

50℃의 온도에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 두 기관 사이에 형성된 경화 결합(cured bond)의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 크고, 여기서 상기 강도는 각각의 온도에서 ASTM D1002 랩 시어(lap shear) 시험에 의해 측정되고, 상기 강도는 파괴 하중(Load at Failure); 파단 인장 에너지(Tensile Energy to Break); 항복 응력(Stress at Yield); 및 항복 변형(Strain at Yield)으로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 측정에 의해 나타난다.

청구항 2

제1항에 있어서, 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형이 원 파트(one part) 접착제 제형인, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 3

제1항에 있어서, 50℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 15% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 4

제3항에 있어서, 50℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 20% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 5

제4항에 있어서, 50℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 30% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 6

제5항에 있어서, 50℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 40% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 7

제6항에 있어서, 50℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 50% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 8

제7항에 있어서, 50℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 75% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 9

제8항에 있어서, 50℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 100% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 10

제1항에 있어서, 50℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 100% 내지 200% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 11

제1항에 있어서, 70℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 40% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 12

제11항에 있어서, 70℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 50% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 13

제12항에 있어서, 70℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 75% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 14

제13항에 있어서, 70℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 적어도 100% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 15

제1항에 있어서, 70℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도가 25℃에서 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합의 강도보다 100% 내지 200% 더 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 16

제1항에 있어서, 상기 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올이, 말단 그룹의 99%, 99.5%, 99.7% 또는 99.8%가 -OH 그룹임을 특징으로 하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 17

제1항에 있어서, 상기 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 이산화탄소와 에틸렌 옥사이드의 공중합체를 포함하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 18

제1항에 있어서, 상기 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 이산화탄소와 프로필렌 옥사이드의 공중합체를 포함하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 19

제1항에 있어서, 상기 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올이, 이산화탄소 및 에틸렌 옥사이드와, 프로필렌 옥사이드, 1,2-부텐 옥사이드, 2,3-부텐 옥사이드, 사이클로헥센 옥사이드, 3-비닐 사이클로헥센 옥사이드, 에피클로로하이드린, 글리시딜 에스테르, 글리시딜 에테르, 스티렌 옥사이드 및 고급 알파 올레핀의 에폭사이드로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 추가의 에폭사이드의 삼원공중합체를 포함하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 20

제1항에 있어서, 상기 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올이, 이산화탄소 및 프로필렌 옥사이드와, 에틸렌 옥사이드, 1,2-부텐 옥사이드, 2,3-부텐 옥사이드, 사이클로헥센 옥사이드, 3-비닐 사이클로헥센 옥사이드, 에피클로로하이드린, 글리시딜 에스테르, 글리시딜 에테르, 스티렌 옥사이드, 및 고급 알파 올레핀의 에폭사이드로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 추가의 에폭사이드의 삼원공중합체를 포함하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 21

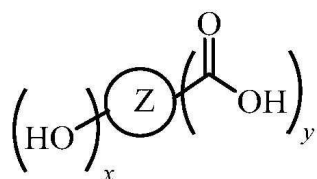
제1항에 있어서, 상기 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 500 g/mol 내지 10,000 g/mol, 또는 500 g/mol 내지 5,000 g/mol, 또는 500 g/mol 내지 4,000 g/mol, 또는 500 g/mol 내지 3,000 g/mol, 또는 500 g/mol 내지 2,500 g/mol, 또는 500 g/mol 내지 1,500 g/mol 범위의 수평균분자량(M_n)을 갖는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 22

제1항에 있어서, 상기 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올이, 상기 폴리올에서 카보네이트 결합의 비율이 99% 이상임을 특징으로 하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 23

제1항에 있어서, 상기 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 하기 화학식을 갖는 다작용성쇄 전이제로부터 유도되는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형:



여기서,



는 다가 잔기(moiety)이고;

x 및 y 는 각각 독립적으로 0 내지 6의 정수이고, 여기서 x 및 y 의 합은 2 내지 6이다.

청구항 24

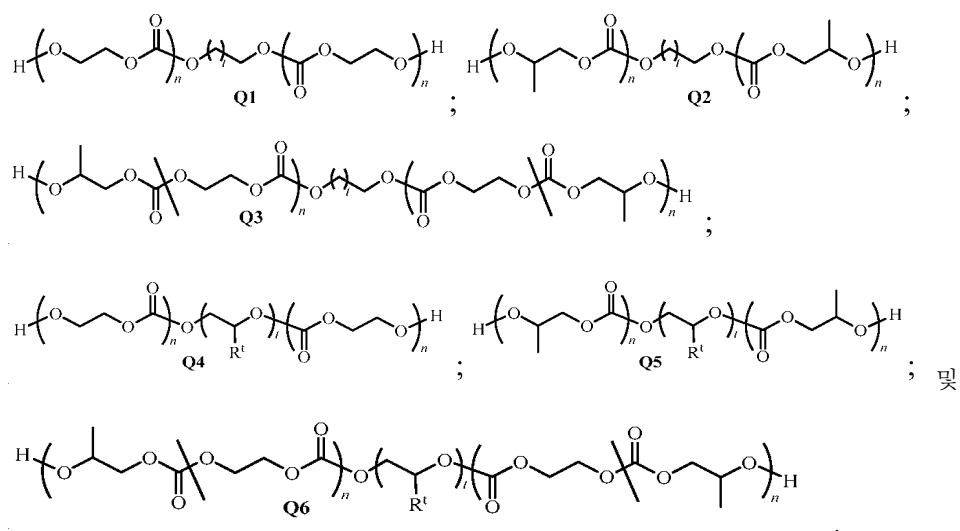
제23항에 있어서, 가 2가 알콜로부터 유도되는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 25

제23항에 있어서, y 가 0이고, x 가 2보다 큰, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 26

제1항에 있어서, 상기 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 하기로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형:



여기서, t 는 1 내지 12를 포함하는 정수이고, R^t 는 독립적으로 각각의 발생에서 $-H$ 또는 $-CH_3$ 이고, n 은 각각의 발생에서 독립적으로 2 내지 50의 정수이다.

청구항 27

제1항에 있어서, 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형이 폴리올 성분의 100중량부를 포함하고, 상기 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 상기 폴리올 성분의 5중량부 내지 100중량부를 포함하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 28

제27항에 있어서, 하나 이상의 쇠 연장제 0.01 내지 20중량부를 추가로 포함하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 29

제27항에 있어서, 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형이 하나 이상의 반응성 소분자 0 내지 20중량부를 추가로 포함하고, 상기 반응성 소분자가 하이드록실, 아민, 티올 및 카복실산으로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 작용기를 포함하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 30

제29항에 있어서, 상기 반응성 소분자가 디올을 포함하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 31

제27항에 있어서, 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형이 0 내지 10중량부의 하나 이상의 첨가제를 추가로 포함하고, 상기 첨가제가 충전제, 점토, 차단제, 안정화제, 텍소트로피 물질, 가소제, 상용화제, 착색제, UV 안정화제 또는 난연제로 이루어진 그룹으로부터 선택되는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 32

제1항에 있어서, 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형에 의해 형성된 경화 결합이, 적어도 60℃의 온도로 가열될 때 이의 실온 강도의 적어도 50%를 유지하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

청구항 33

제1항에 있어서, 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형의 경화된 샘플은 실온에서 1주일 동안 톨루엔에 침지시 5% 미만의 질량 증가를 특징으로 하거나, 상기 반응성 폴리우레탄 접착제 제형의 경화된 샘플은 실온에서 1주일 동안 크실렌에 침지시 1% 미만의 질량 증가를 특징으로 하는, 반응성 폴리우레탄 접착제 제형.

발명의 설명

기술 분야

[0001]

정부 지원

[0002]

본 발명은 자원부에 의해 수여된 증서번호 DE-FE0002474 하의 미국 정부 지원으로 부분적으로 수행되었다. 미국 정부는 본 발명에 일정한 권리를 갖는다.

[0003]

우선권 주장

[0004]

본원은 미국 특허 분류 번호에 대한 우선권을 주장한다. 각각 전문이 본원에 참조로 인용된 미국 제61/625,065호(2012년 4월 16일 출원됨) 및 제61/683,277호(2012년 8월 15일 출원됨).

[0005]

발명의 분야

[0006]

본 발명은 중합체 분야에 관한 것이다. 보다 특히, 본 발명은 에폭사이드와 이산화탄소의 공중합으로부터 유도된 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 도입하는 폴리우레탄 접착제에 관한 것이다. 폴리우레탄 접착제는 접착성 필름을 제조할 뿐만 아니라 두 기판을 서로 결합하기 위해 사용된다.

배경 기술

[0007]

폴리우레탄 접착제는 조성이 매우 다양하고, 많은 상이한 적용 및 시장 부분에 사용되는 독특한 우레탄 생성물 그룹이다. 통상적인 제품 형태는 그 중에서도 특히 1-성분, 2-성분 및 핫-멜트 조성물과 같은 반응성 형태 뿐만 아니라 용매형, 수성 및 핫-멜트 조성물과 같은 비-반응성 형태를 포함한다.

[0008]

폴리우레탄 접착제는 보통 접착제를 포함하는 중합체의 분자 골격에 다수의 우레탄 그룹을 함유하거나,쇄의 나머지의 화학적 조성과 무관하게, 사용 동안 형성되는 접착제로서 정의된다. 따라서, 전형적인 우레탄 접착제는, 우레탄 결합 이외에, 지방족 및 방향족 탄화수소, 에스테르, 에테르, 아마이드, 우레아 및 알로포네이트 그룹을 함유할 수 있다. 이소시아네이트 그룹은 폴리올의 하이드록실 그룹과 반응하여 반복하는 우레탄 결합을 형성한다. 이소시아네이트는 물과 반응하여 우레탄 결합 및 부산물로서 이산화탄소를 형성한다. 선형 폴리우레탄 접착제는 디이소시아네이트 및 디올과 같은 2개의 반응성 그룹을 갖는 화합물을 사용하여 수득할 수 있다. 3개 이상의 하이드록실 그룹(즉, 3개 이상의 작용성)을 갖는 폴리올을 폴리이소시아네이트와 반응시킬 경우, 또는 3개 이상의 이소시아네이트 그룹을 갖는 이소시아네이트를 폴리올과 반응시킬 경우, 생성되는 중합체는 가교결합된다. 과량의 이소시아네이트가 존재하는 반응 시스템에서, 가교결합 반응이 일어날 수 있다. 흔히, 조성물 중의 과량의 이소시아네이트는 기판에 함유된 대기 물 또는 수분과 반응한다.

[0009]

한 성분 접착제는 일반적으로 실온에서 점성 액체인 이소시아네이트-말단화 프리폴리머이다. 그들은 유리 이소시아네이트 그룹과 대기 수분 또는 폴리우레아 그룹을 형성하는 기판에 함유된 수분과의 반응에 의해 설정한다.

그들은 통상적으로 경화 전에 기타 성분과의 혼합을 필요로 하지 않는다. 프리폴리머는 과량의 이소시아네이트를 폴리올과 반응시킴으로써 제조된다. 프리폴리머의 작용성이 2 초과이면, 경화된 필름은 화학적으로 가교결합될 것이다.

[0010] 두 성분 폴리우레탄 접착제 조성물은 일반적으로 이들이 함께 혼합되기 전에 실온에서 액체 또는 페이스트인 성분을 포함한다. 조성물의 제1 성분은 폴리올 및 기타 성분, 예를 들어, 쇠 연장제, 촉매, 차단제 및 경우에 따라 기타 첨가제를 포함한다. 제2 성분은 단량체성, 중합체성 또는 프리폴리머성 폴리이소시아네이트를 포함한다. 결합을 형성하기 위해, 접착제의 두 성분을 함께 충분히 혼합한 다음, 조성물을 기판에 도포한다. 이어서, 혼합된 조성물은 경화를 개시하고, 고체 형태로 변형되는 동안 결합 강도를 개발한다. 경화 반응은 유리 이소시아네이트 그룹과 폴리올로부터의 활성 수소 사이에서 발생한다. 주요 경화 반응 후 과량의 유리 이소시아네이트 그룹이 존재할 경우, 과량의 유리 이소시아네이트 그룹을 기판으로부터 주위 또는 표면 수분에 의해 경화시킨다. 사용된 이소시아네이트 및 폴리올은 2 이상의 작용성을 가져 접착제에 가교결합을 제공할 수 있다.

[0011] 반응성 핫 멜트 접착제는 일반적으로 실온에서 고체 또는 매우 점성인 용이하게 용융가능한 폴리이소시아네이트 폴리우레탄(NCO 프리폴리머)으로 특성화된다. 이들은 모두 냉각시켜 물리적으로, 그리고 대기 수분과의 반응으로 화학적으로 설정한다. 제형에 따라, 반응성 폴리우레탄 핫-멜트 접착제는 가요성 내지 경질 특성 및 강건한 접착제 층을 갖는 엘라스토머를 형성하기 위해 경화시킨다. 프리폴리머는 통상적으로 낮은 유리 이소시아네이트 함량을 갖는다.

[0012] 비반응성 용매계 및 수성 접착제는 통상적으로 용매에 용해된 하이드록실 말단화 폴리우레탄으로 이루어진다. 폴리우레탄은 일반적으로 디올과 디이소시아네이트를 반응시킴으로써 수득된다. 중합체 용액은 결합되는 두 기판 표면에 적용하고, 약간의 시간이 용매가 증발하도록 허용되고, 중합체 쇠의 상호확산이 일어나는 시점에서 표면을 결합시킨다.

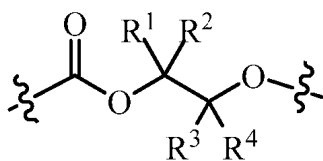
[0013] 비반응성 핫 멜트 접착제는 통상적으로 실온에서 고체인 선형 쇠로 이루어지고, 그들이 다수의 기타 적용을 갖지만, 흔히 텍스타일의 적층화에 사용된다. 그들은 일반적으로 용융된 상태에서부터 냉각시킴으로써 접착성 결합을 형성하는 하이드록실-말단화 폴리우레탄으로 이루어진다. 몇몇 경우에, 이들은 또한 열가소성 폴리우레탄 접착제로서 공지되어 있다.

[0014] 폴리카보네이트 폴리올은 폴리우레탄 분야에서 시판되고 있다. 그러나, 통상의 물질은 구조 면에서 이하 기술된 발명에서 사용된 것들과 상이하다. 통상의 폴리카보네이트 폴리올은 모두 디올 단위 사이에 카보네이트 결합을 생성하기 위해 포스겐(또는 반응성 등가물)과 반응되는 디올(예: 1,4 부탄 디올, 1,6-헥산 디올 등)로부터 유도된다. 어떤 통상의 폴리카보네이트 폴리올도 단지 2개의 탄소원자만 갖지 않는데, 이는 이러한 물질의 합성이 반응이 중합체보다 오히려 사이클릭 카보네이트의 형성을 유도하기 때문에 포스겐 화학으로 가능하지 않기 때문이다. 이러한 폴리올의 제조방법은 또한 특히 녹색이 아니다. 포스겐은 독성이고, 디올은 일반적으로 고가이고, 제조하기에 에너지 집약적이고, 심지어 비-포스겐계 공정은 에너지 집약적이고, 작동하기에는 고가이다.

[0015] 기존의 폴리카보네이트 폴리올은 비록 고가이지만 우수한 강도 및 가수분해 및 UV 방사선에 대한 내성을 갖는 것으로 인지되고, 따라서 고성능이 필요한 경우에 사용된다. 그럼에도 불구하고, 이러한 물질에 대한 경제적인 녹색 대체물이 요구된다.

[0016] 발명의 요약

[0017] 하나의 국면에서, 본 발명은 CO₂와 하나 이상의 에폭사이드의 공중합으로부터 유도된 지방족 폴리카보네이트 폴리올 및 폴리이소시아네이트를 포함하는 폴리우레탄 접착제를 포함한다. 하나의 국면에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올 쇠는 다음 구조를 갖는 1차 반복 단위를 함유한다:



[0018] ,

[0019] 여기서, R¹, R², R³ 및 R⁴는, 상기 중합체 쇠에서의 각각의 발생에서, -H, 불소, 임의로 치환된 C₁₋₄₀ 지방족 그룹, 임의로 치환된 C₁₋₂₀ 헤테로지방족 그룹 및 임의로 치환된 아릴 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 독립적

로 선택되고, 여기서 R^1 , R^2 , R^3 및 R^4 중의 어느 둘 이상은 임의로, 개재 원자들과 함께, 임의로 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성한다.

[0020] 상기 주어진 바와 같이, 이러한 폴리카보네이트 폴리올은, 모두가 인접하는 카보네이트 결합 사이에 포획된 2개 이상의 탄소 원자를 갖는 기존의 통상의 폴리카보네이트 폴리올과 상이하다. 따라서, 본 발명의 폴리올은 단위쇄 길이당 고밀도의 카보네이트 작용 그룹을 갖는다. 특정 구현예에서, 이러한 폴리올의 도입은 생성되는 접착제에 독특하고 예기치 않은 특성을 유도한다. 특정 국면에서, 본 접착제는 기존의 시판 폴리카보네이트 폴리올을 기초로 하는 것들에 비해 예기치 않게 우수한 특성을 갖는다.

[0021] 특정 구현예에서, 이러한 지방족 폴리카보네이트 쇠는 이산화탄소와 하나 이상의 에폭사이드 기관의 공중합으로부터 유도된다. 이러한 공중합은 전문이 본원에 참조로 인용된 공개된 PCT 출원 제WO 2010/028362호에 예시된다. 일부 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 옥사이드 또는 임의로 치환된 C_{3-30} 지방족 에폭사이드, 또는 이들 중 둘 이상의 혼합물로부터 유도된다. 일부 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 20,000g/mol 미만의 수평균분자량 (M_n)을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 약 1.8 내지 약 6의 작용성 수를 갖는다.

[0022] 또 하나의 국면에서, 본 발명은 폴리이소시아네이트 화합물과의 반응으로부터 형성된 우레탄 결합을 통해 결합된 다수의 에폭사이드- CO_2 -유도된 폴리올을 포함하는 이소시아네이트-말단화 프리폴리머를 포함한다.

[0023] 또 하나의 구현예에서, 본 발명은 본 발명의 접착제 조성물을 기관 중의 적어도 하나와 접촉시키고, 기관을 접착제가 적용되는 부분에 따라 함께 접촉시키고, 접착제를 경화시키고 이로써 기관을 함께 결합시킴으로써 두 기관을 함께 결합시키는 공정을 포함한다.

[0024] 정의

[0025] 특정 작용 그룹 및 화학적 용어의 정의는 이하 보다 상세히 기술된다. 본 발명의 목적을 위해, 화학적 원소는 문헌(참조: the Periodic Table of the Elements, CAS version, Handbook of Chemistry and Physics, 75th Ed., inside cover)에 따라 식별되고, 특정 작용 그룹은 일반적으로 본원에 기술된 바와 같이 정의된다. 추가로, 유기 화학의 일반적 원리, 뿐만 아니라 특정 작용성 잔기 및 반응성은 각각 전문이 본원에 참조로 인용된 문헌(참조: *Organic Chemistry*, Thomas Sorrell, University Science Books, Sausalito, 1999; Smith and March *March's Advanced Organic Chemistry*, 5th Edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001; Larock, *Comprehensive Organic Transformations*, VCH Publishers, Inc., New York, 1989; Carruthers, *Some Modern Methods of Organic Synthesis*, 3rd Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 1987)에 기재되어 있다.

[0026] 본 발명의 특정 화합물은 하나 이상의 비대칭성 중심을 포함할 수 있고, 따라서 다양한 입체이성체 형태, 예를 들어, 거울상이성질체 및/또는 디아스테레오머로 존재할 수 있다. 따라서, 본 화합물 및 이의 조성물은 개별 거울상이성질체, 디아스테레오머 또는 기타 이성체의 형태로 존재할 수 있거나, 입체이성체의 혼합물 형태로 존재할 수 있다. 특정 구현예에서, 본 발명의 화합물은 거울상 순수 화합물이다. 특정 구현예에서, 거울상이성질체 또는 디아스테레오머의 혼합물이 제공된다.

[0027] 또한, 특정 화합물은 본원에 기술된 바와 같이 다르게 기술되지 않는 한 *Z* 또는 *E* 이성체로서 존재할 수 있는 하나 이상의 이중 결합을 가질 수 있다. 본 발명은 추가로 화합물을 실질적으로 기타 이성체를 함유하지 않는 개별 이성체로서, 또는 다양한 이성체의 혼합물로서, 예를 들어, 거울상이성질체의 라세미체 혼합물로서 포함한다. 상기한 화합물 자체 이외에, 본 발명은 또한 하나 이상의 화합물을 포함하는 조성물을 포함한다.

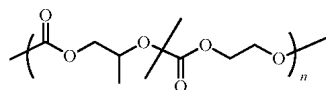
[0028] 본원에 사용된 용어 "이성체"는 임의의 및 모든 기타 이성체 및 입체이성체를 포함한다. 예를 들어, "이성체"는 *시스*- 및 *트랜스*-이성체, *E*- 및 *Z*-이성체, *R*- 및 *S*-거울상이성질체, 디아스테레오머, (*d*)-이성체, (*l*)-이성체, 이의 라세미체 혼합물, 및 본 발명의 범위에 속하는 이의 기타 혼합물을 포함한다. 예를 들어, 입체이성체는, 일부 구현예에서, 하나 이상의 상응하는 입체이성체를 실질적으로 함유하지 않고 제공될 수 있고, 또한 "입체화학적으로 풍부한"로서 칭명될 수 있다.

[0029] 특별한 거울상이성질체가 바람직할 경우, 이는, 일부 구현예에서, 대향하는 거울상이성질체를 실질적으로 함유하지 않고 제공될 수 있고, 또한 "광학적으로 풍부한"로서 칭명될 수 있다. 본원에서 사용된 "광학적으로 풍부한"은 화합물 또는 중합체가 하나의 거울상이성질체의 상당히 높은 비율로 구성된다는 것을 의미한다. 특정 구

현예에서, 화합물은 적어도 약 90중량%의 바람직한 거울상이성질체로 구성된다. 기타 구현예에서, 화합물은 적어도 약 95중량%, 98중량% 또는 99중량%의 바람직한 거울상이성질체로 구성된다. 바람직한 거울상이성질체는 키랄성 고성능 액체 크로마토그래피(HPLC) 및 키랄성 염의 형성 및 결정화를 포함하는 당해 기술 분야의 숙련자에게 공지된 임의의 방법에 의해 라세미체 혼합물로부터 분리될 수 있거나, 비대칭 합성에 의해 제조될 수 있다. 예를 들어, 문헌(참조: Jacques, et al., *Enantiomers, Racemates and Resolutions* (Wiley Interscience, New York, 1981); Wilen, S.H., et al., *Tetrahedron* 33:2725 (1977); Eliel, E.L. *Stereochemistry of Carbon Compounds* (McGraw-Hill, NY, 1962); Wilen, S.H. *Tables of Resolving Agents and Optical Resolutions* p. 268 (E.L. Eliel, Ed., Univ. of Notre Dame Press, Notre Dame, IN 1972)).

[0030] 본원에 사용된 용어 "에폭사이드"는 치환되거나 치환되지 않은 옥시란을 의미한다. 이러한 치환된 옥시란은 일 치환된 옥시란, 이치환된 옥시란, 삼치환된 옥시란 및 사치환된 옥시란을 포함한다. 이러한 에폭사이드는 본원에 정의된 바와 같이 추가로 임의로 치환될 수 있다. 특정 구현예에서, 에폭사이드는 단일 옥시란 잔기를 포함한다. 특정 구현예에서, 에폭사이드는 2개 이상의 옥시란 잔기를 포함한다.

[0031] 본원에 사용된 용어 "중합체"는 비교적 높은 분자 질량을 갖는 분자를 의미하고, 이의 구조는 낮은 비교적 낮은 분자 질량을 갖는 분자로부터 실제로 또는 개념적으로 유도된 다수의 반복 단위를 포함한다. 특정 구현예에서, 중합체는 실질적으로 CO₂ 및 에폭사이드 (예를 들어, 폴리(에틸렌 카보네이트)로부터 유도된 교차 단위로 구성된다. 특정 구현예에서, 본 발명의 중합체는 둘 이상의 상이한 에폭사이드 단량체를 도입한 공중합체, 삼원공중합체, 헤테로중합체, 블록 공중합체 또는 태퍼링 헤테로중합체이다. 이러한 고급 중합체의 구조적 묘사와 관련하여, 슬래시로 분할된 상이한 단량체 단위의 포획을 나타내는 전환이 본원에서 사용될 수 있다



. 이러한 구조물은 다르게 구체화되지 않는 한 묘사된 임의의 비의 상이한 단량체 단위를 도입하는 공중합체를 포함하는 것으로 해석되어야 한다. 이 묘사는 또한 랜덤, 태퍼링, 블록 공중합체를 나타내는 것을 의미하고, 다르게 구체화되지 않는 한, 이들 중 임의의 둘 이상의 조합 및 이들 모두의 조합을 암시한다.

[0032] 본원에 사용된 용어 "할로" 및 "할로젠"은 불소 (플루오로, -F), 염소 (클로로, -Cl), 브롬 (브로모, -Br) 및 요오드 (요오도, -I)로부터 선택된 원자를 의미한다.

[0033] 본원에 사용된 용어 "지방족" 또는 "지방족 그룹"은 직쇄 (즉, 분지되지 않음), 분지된 또는 사이클릭 (융합된, 브릿징 및 스피로-융합된 폴리사이클릭 포함)일 수 있고, 완전히 포화될 수 있거나 방향족은 아니지만 하나 이상의 불포화 단위를 함유할 수 있는 탄화수소 잔기를 나타낸다. 다르게 구체화되지 않는 한, 지방족 그룹은 1 내지 40개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 지방족 그룹은 1 내지 20개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 지방족 그룹은 3 내지 20개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 지방족 그룹은 1 내지 12개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 지방족 그룹은 1 내지 8개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 지방족 그룹은 1 내지 6개의 탄소 원자를 함유한다. 일부 구현예에서, 지방족 그룹은 1 내지 5개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 1 내지 4개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 지방족 그룹은 1 내지 3개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 지방족 그룹은 1 또는 2개의 탄소 원자를 함유한다. 적합한 지방족 그룹은 선형 또는 분지된 알킬, 알케닐 및 알키닐 그룹, 및 이의 하이브리드, 예를 들어, (사이클로알킬)알킬, (사이클로알케닐)알킬 또는 (사이클로알킬)알케닐을 포함하나, 이에 국한되지 않는다.

[0034] 본원에 사용된 용어 "헤테로지방족"은 하나 이상의 탄소 원자가 산소, 황, 질소 또는 인으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 원자로 독립적으로 치환되는 지방족 그룹을 의미한다. 특정 구현예에서, 1 내지 6개의 탄소 원자는 하나 이상의 산소, 황, 질소 또는 인으로 독립적으로 치환된다. 헤테로지방족 그룹은 치환되거나 치환되지 않고, 분지되거나 분지되지 않고, 사이클릭 또는 비환식일 수 있고, 포화되고, 불포화되거나 부분적으로 불포화된 그룹을 포함할 수 있다.

[0035] 본원에 사용된 용어 "이가 C₁₋₈ (또는 C₁₋₃) 포화되거나 불포화된 직쇄 또는 분지된 탄화수소 쇠"는 본원에서 정의된 바와 같은 직쇄 또는 분지된 2가 알킬, 알케닐 및 알키닐 쇠를 의미한다.

[0036] 본원에 사용된 용어 "불포화된"은 잔기가 하나 이상의 이중 또는 삼중 결합을 갖는다는 것을 의미한다.

[0037] 단독으로 또는 거대 잔기의 일부로서 사용된 용어 "지환족", "카보사이클" 또는 "카보사이클릭"은 3 내지 12개의 원자를 갖는, 본원에서 기술된 바와 같은 포화되거나 부분 불포화된 사이클릭 지방족 모노사이클릭 또는 폴리

사이클릭 환 시스템을 의미하고, 여기서 지방족 환 시스템은 이므로 상기 정의되고 본원에 기술된 바와 같이 치환된다. 지방족 그룹은 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 사이클로헥세닐, 사이클로헥세닐, 사이클로헥틸, 사이클로헥테닐, 사이클로옥틸, 사이클로옥테닐, 노르보르닐, 아다만틸 및 사이클로옥타디에닐을 포함하지만, 이에 국한되지 않는다. 일부 구현예에서, 사이클로알킬은 3 내지 6개의 탄소를 갖는다. 용어 "지방족", "카보사이클" 또는 "카보사이클릭"은 또한 하나 이상의 방향족 또는 비방향족 환, 예를 들어, 테카하이드로나프틸 또는 테트라하이드로나프틸에 융합된 지방족 환을 포함하고, 여기서 결합 라디칼 또는 점은 지방족 환 위에 존재한다. 특정 구현예에서, 용어 "3원 내지 7원 카보사이클"은 3원 내지 7원 포화되거나 부분 불포화된 모노사이클릭 카보사이클릭 환을 의미한다. 특정 구현예에서, 용어 "3원 내지 8원 카보사이클"은 3원 내지 8원 포화되거나 부분 불포화된 모노사이클릭 카보사이클릭 환을 의미한다. 특정 구현예에서, 용어 "3원 내지 14원 카보사이클" 및 " C_{3-14} 카보사이클"은 3원 내지 8원 포화되거나 부분 불포화된 모노사이클릭 카보사이클릭 환 또는 7원 내지 14원 포화되거나 부분 불포화된 폴리사이클릭 카보사이클릭 환을 의미한다.

[0038] 본원에 사용된 용어 "알킬"은 단일 수소원자의 제거로 1 내지 6개의 탄소 원자를 함유하는 지방족 잔기로부터 유도된 포화된 직쇄 또는 측쇄 탄화수소 라디칼을 의미한다. 다르게 구체화되지 않는 한, 알킬 그룹은 1 내지 12개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 알킬 그룹은 1 내지 8개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 알킬 그룹은 1 내지 6개의 탄소 원자를 함유한다. 일부 구현예에서, 알킬 그룹은 1 내지 5개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 알킬 그룹은 1 내지 4개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 알킬 그룹은 1 내지 3개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 알킬 그룹은 1 내지 2개의 탄소 원자를 함유한다. 알킬 라디칼의 예는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소-부틸, 2급-부틸, 2급-펜틸, 이소-펜틸, 3급-부틸, n-펜틸, 네오펜틸, n-헥실, 2급-헥실, n-헥틸, n-옥틸, n-데실, n-운데실, 도데실 등을 포함하나, 이에 국한되지 않는다.

[0039] 본원에 사용된 용어 "알케닐"은 단일 수소원자의 제거로 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 갖는 직쇄 또는 측쇄 지방족 잔기로부터 유도된 1가 그룹을 나타낸다. 다르게 구체화되지 않는 한, 알케닐 그룹은 2 내지 12개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 알케닐 그룹은 2 내지 8개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 알케닐 그룹은 2 내지 6개의 탄소 원자를 함유한다. 일부 구현예에서, 알케닐 그룹은 2 내지 5개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 알케닐 그룹은 2 내지 4개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 알케닐 그룹은 2 내지 3개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 알케닐 그룹은 2개의 탄소 원자를 함유한다. 알케닐 그룹은, 예를 들어, 에테닐, 프로페닐, 부테닐, 1-메틸-2-부텐-1-일 등을 포함한다.

[0040] 본원에 사용된 용어 "알키닐"은 단일 수소원자의 제거로 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합을 갖는 직쇄 또는 측쇄 지방족 잔기로부터 유도된 1가 그룹을 의미한다. 다르게 구체화되지 않는 한, 알키닐 그룹은 2 내지 12개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 알키닐 그룹은 2 내지 8개의 탄소 원자를 함유한다. 특정 구현예에서, 알키닐 그룹은 2 내지 6개의 탄소 원자를 함유한다. 일부 구현예에서, 알키닐 그룹은 2 내지 5개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 알키닐 그룹은 2 내지 4개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 알키닐 그룹은 2 내지 3개의 탄소 원자를 함유하고, 일부 구현예에서, 알키닐 그룹은 2개의 탄소 원자를 함유한다. 대표적인 알키닐 그룹은 에티닐, 2-프로피닐 (프로파길), 1-프로피닐 등을 포함하지만, 이에 국한되지 않는다.

[0041] 본원에 사용된 용어 "알콕시"는 산소원자를 통해 부모 분자에 결합된, 이미 정의된 바와 같은 알킬 그룹을 의미한다. 알콕시의 예는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로폭시, n-부톡시, 3급-부톡시, 네오펜톡시 및 n-헥소키를 포함하지만, 이에 국한되지 않는다.

[0042] 본원에 사용된 용어 "아실"은 카보닐-함유 작용기, 예를 들어, $-C(=O)R'$ (여기서, R' 는 수소 또는 임의로 치환된 지방족, 헤테로지방족, 헤테로사이클릭, 아릴, 헤테로아릴 그룹이거나 치환된(예를 들어, 수소 또는 지방족, 헤테로지방족, 아릴 또는 헤테로아릴 잔기로)) 산소 또는 질소 함유 작용기(예를 들어, 카복실산, 에스테르 또는 아마이드 작용기 형성)를 의미한다. 본원에 사용된 용어 "아실옥시"는 산소원자를 통해 부모 분자에 결합된 아실 그룹을 의미한다.

[0043] 단독으로 또는 "아르알킬", "아르알콕시" 또는 "아릴옥시알킬"에서와 같이 거대 잔기의 일부로서 사용된 용어 "아릴"은 총 5 내지 20개의 환 원을 갖는 모노사이클릭 및 폴리사이클릭 환 시스템을 의미하고, 여기서 시스템 중의 적어도 하나의 환은 방향족이고 시스템 중의 각각의 환은 3 내지 12개의 환 원을 함유한다. 용어 "아릴"은 용어 "아릴 환"과 상호교환적으로 사용될 수 있다. 본 발명의 특정 구현예에서, "아릴"은 페닐, 비페닐, 나프틸, 안트라실 등을 포함하지만, 이에 국한되지 않고, 하나 이상의 치환체를 포함할 수 있는 방향족 환 시스템을 의미한다. 또한, 본원에 사용될 경우 용어 "아릴"의 범위내에, 방향족 환이 하나 이상의 추가의 환 등에

융합된 그룹, 예를 들어, 벤조푸라닐, 인다닐, 프탈이미딜, 나프티미딜, 펜안트리디닐 또는 테트라하이드로나프틸이 포함된다. 특정 구현예에서, 용어 "6원 내지 10원 아릴" 및 " C_{6-10} 아릴"은 페닐 또는 8원 내지 10원 폴리사이클릭 아릴 환을 의미한다.

[0044]

단독으로 사용되거나, 거대 잔기, 예를 들어, "헤테로아르알킬" 또는 "헤테로아르알콕시"의 일부로서 사용되는 용어 "헤테로아릴" 및 "헤테로아르-"는 5 내지 14개의 환 원자, 바람직하게는 5, 6 또는 9개의 환 원자를 갖고; 사이클릭 어레이에 공유된 6, 10 또는 14개의 π 전자를 갖고; 탄소 원자 이외에, 1 내지 5개의 헤테로원자를 갖는 그룹을 의미한다. 용어 "헤테로원자"는 질소, 산소 또는 황을 의미하고, 질소 또는 황의 임의의 산화된 형태 및 염기성 질소의 임의의 4급화 형태를 포함한다. 헤테로아릴 그룹은 티에닐, 푸라닐, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 옥사졸릴, 이속사졸릴, 옥사디아졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 티아디아졸릴, 피리디닐, 피리다지닐, 피리미디닐, 피라지닐, 인돌리지닐, 푸리닐, 나프티리디닐, 벤조푸라닐 및 프테리디닐을 포함하지만, 이에 국한되지 않는다. 본원에 사용된 용어 "헤테로아릴" 및 "헤테로아르-"는 또한 헤테로방향족 환이 하나 이상의 아릴, 지환족 또는 헤테로사이클릭 환에 융합되고, 여기서 결합 라디칼 또는 점은 헤테로방향족 환 위에 존재하는 그룹을 포함한다. 비제한적인 예는 인돌릴, 이소인돌릴, 벤조티에닐, 벤조푸라닐, 디벤조푸라닐, 인다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈티아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 프탈라지닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 4H-퀴놀리지닐, 카바졸릴, 아크리디닐, 페나지닐, 페노티아지닐, 페녹사지닐, 테트라하이드로퀴놀리닐, 테트라하이드로이소퀴놀리닐 및 피리도[2,3-b]-1,4-옥사진-3(4H)-온을 포함한다. 헤테로아릴 그룹은 모노- 또는 비사이클릭일 수 있다. 용어 "헤테로아릴"은 용어 "헤테로아릴 환", "헤테로아릴 그룹" 또는 "헤테로방향족"과 상호교환적으로 사용될 수 있고, 임의의 이 용어는 임의로 치환된 환을 포함한다. 용어 "헤테로아르알킬"은 헤테로아릴로 치환된 알킬 그룹을 의미하고, 여기서 알킬 및 헤테로아릴 부분은 독립적으로 임의로 치환된다. 특정 구현예에서, 용어 "5원 내지 10원 헤테로아릴"은 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 헤테로아릴 환 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 10원 비사이클릭 헤테로아릴환을 의미한다. 특정 구현예에서, 용어 "5원 내지 12원 헤테로아릴"은 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 5원 내지 6원 헤테로아릴 환 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 8원 내지 12원 비사이클릭 헤테로아릴 환을 의미한다.

[0045]

본원에 사용된 용어 "헤테로사이클", "헤테로사이클릴", "헤테로사이클릭 라디칼" 및 "헤테로사이클릭 환"은 상호교환적으로 사용되고, 포화되거나 부분적으로 불포화되고, 탄소 원자 이외에, 상기 정의된 바와 같은 헤테로원자를 하나 이상, 바람직하게는 1 내지 4개 갖는 안정한 5원 내지 7원 모노사이클릭 또는 7원 내지 14원 폴리사이클릭 헤테로사이클릭 잔기를 의미한다. 헤테로사이클의 환 원자를 참조로 사용될 경우, "질소"는 치환된 질소를 포함한다. 예로써, 산소, 황 또는 질소로부터 선택된 0 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 포화되거나 부분 불포화된 환에서, 질소는 N (3,4-디하이드로-2H-피롤릴에서와 같이), NH (피롤리디닐에서와 같이), 또는 NR (N-치환된 피롤리디닐에서와 같이)일 수 있다. 일부 구현예에서, 용어 "3원 내지 7원 헤테로사이클릭"은 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 2개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 7원 포화되거나 부분 불포화된 모노사이클릭 헤테로사이클릭 환을 의미한다. 일부 구현예에서, 용어 "3원 내지 12원 헤테로사이클릭"은 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 2개의 헤테로원자를 갖는 3원 내지 8원 포화되거나 부분 불포화된 모노사이클릭 헤테로사이클릭 환, 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3개의 헤테로원자를 갖는 7원 내지 12원 포화되거나 부분 불포화된 폴리사이클릭 헤테로사이클릭 환을 의미한다.

[0046]

헤테로사이클릭 환은 안정한 구조를 유도하는 임의의 헤테로원자 또는 탄소 원자에서 이의 펜던트 그룹에 결합될 수 있고, 임의의 환 원자는 임의로 치환될 수 있다. 이러한 포화되거나 부분적으로 불포화된 헤테로사이클릭 라디칼의 예는 테트라하이드로푸라닐, 테트라하이드로티에닐, 피롤리디닐, 피롤리도닐, 피페리디닐, 피롤리닐, 테트라하이드로퀴놀리닐, 테트라하이드로이소퀴놀리닐, 데카하이드로퀴놀리닐, 옥사졸리디닐, 피페라지닐, 디옥사닐, 디옥솔라닐, 디아제피닐, 옥사제피닐, 티아제피닐, 모르폴리닐 및 퀴놀리디닐을 포함하나, 이에 국한되지 않는다. 용어 "헤테로사이클", "헤테로사이클릴", "헤테로사이클릭 환", "헤테로사이클릭 그룹", "헤테로사이클릭 잔기" 및 "헤테로사이클릭 라디칼"은 본원에서 상호교환적으로 사용되고, 또한 헤테로사이클릭 환이 하나 이상의 아릴, 헤테로아릴 또는 지환족 환, 예를 들어, 인돌리닐, 3H-인돌릴, 크로마닐, 펜안트리디닐 또는 테트라하이드로퀴놀리닐에 융합된 그룹을 포함하고, 여기서 결합 라디칼 또는 점은 헤테로사이클릭 환 위에 존재한다. 헤테로사이클릭 그룹은 모노- 또는 비사이클릭일 수 있다. 용어 "헤테로사이클릭알킬"은 헤테로사이클릭으로 치환된 알킬 그룹을 의미하고, 여기서 알킬 및 헤테로사이클릭 부분은 독립적으로 임의로 치환된다.

[0047]

본원에 사용된 용어 "부분적으로 불포화된"은 적어도 하나의 이중 또는 삼중 결합을 포함하는 환 잔기를 의미한다.

다. 용어 "부분적으로 불포화된"은 다수의 불포화 부위를 갖는 환을 포함하는 것을 의도하지만, 본원에서 정의된 바와 같은 아릴 또는 헤테로아릴 잔기를 포함하는 것을 의도하지는 않는다.

[0048]

본원에 기술된 바와 같이, 본 발명의 화합물은 "임의로 치환된" 잔기를 함유할 수 있다. 일반적으로, 용어 "치환된"은 용어 "임의로"가 선행하든 하지 않든, 지정된 잔기의 하나 이상의 수소가 적합한 치환체로 치환됨을 의미한다. 다르게 기술되지 않는 한, "임의로 치환된" 그룹은 상기 그룹의 각 치환가능한 위치에 적합한 치환체를 가질 수 있고, 임의의 제공된 구조에서 하나 이상의 위치가 구체화된 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 치환체로 치환될 수 있는 경우, 치환체는 모든 위치에서 동일하거나 상이할 수 있다. 본 발명에 의해 계획된 치환체의 조합은 바람직하게는 안정한 또는 화학적으로 실현가능한 화합물의 형성을 유도하는 것들이다. 본원에 사용된 용어 "안정한"은 이들의 생산, 검출 및, 특정 구현예에서, 본원에 기술된 하나 이상의 목적을 위해 이들의 회수, 정제 및 사용을 허용하는 조건에 적용될 경우 실질적으로 변경되지 않는 화합물을 의미한다.

[0049]

"임의로 치환된" 그룹의 치환가능한 탄소 원자 상의 적합한 1가 치환체는 독립적으로 할로젠; $-(CH_2)_{0-4}R^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}OR^\circ$; $-O-(CH_2)_{0-4}C(O)OR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}CH(OR^\circ)_2$; $-(CH_2)_{0-4}SR^\circ$; R° 로 치환될 수 있는 $-(CH_2)_{0-4}Ph$; R° 로 치환될 수 있는 $-(CH_2)_{0-4}O(CH_2)_{0-1}Ph$; R° 로 치환될 수 있는 $-CH=CHPh$; $-NO_2$; $-CN$; $-N_3$; $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)_2$; $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)R^\circ$; $-N(R^\circ)C(S)R^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)NR^\circ_2$; $-N(R^\circ)C(S)NR^\circ_2$; $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)OR^\circ$; $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)R^\circ$; $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)NR^\circ_2$; $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)OR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}C(O)R^\circ$; $-C(S)R^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}C(O)OR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}C(O)N(R^\circ)_2$; $-(CH_2)_{0-4}C(O)SR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}C(O)OSiR^\circ_3$; $-(CH_2)_{0-4}OC(O)R^\circ$; $-OC(O)(CH_2)_{0-4}SR^\circ$; $-SC(S)SR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}SC(O)R^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}C(O)NR^\circ_2$; $-C(S)NR^\circ_2$; $-C(S)SR^\circ$; $-SC(S)SR^\circ$, $-(CH_2)_{0-4}OC(O)NR^\circ_2$; $-C(O)N(OR^\circ)R^\circ$; $-C(O)C(O)R^\circ$; $-C(O)CH_2C(O)R^\circ$; $-C(NOR^\circ)R^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}SSR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}S(O)_2R^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}S(O)_2OR^\circ$; $-(CH_2)_{0-4}OS(O)_2R^\circ$; $-S(O)_2NR^\circ_2$; $-(CH_2)_{0-4}S(O)R^\circ$; $-N(R^\circ)S(O)_2NR^\circ_2$; $-N(R^\circ)S(O)_2R^\circ$; $-N(OR^\circ)R^\circ$; $-C(NH)NR^\circ_2$; $-P(O)_2R^\circ$; $-P(O)R^\circ_2$; $-OP(O)R^\circ_2$; $-OP(O)(OR^\circ)_2$; SiR°_3 ; $-(C_{1-4}$ 직쇄 또는 분지된 알킬렌) $O-N(R^\circ)_2$; 또는 $-(C_{1-4}$ 직쇄 또는 분지된 알킬렌) $C(O)O-N(R^\circ)_2$ 이고, 여기서 각각의 R° 는 이하 정의된 바와 같이 치환될 수 있고, 독립적으로 수소, C_{1-8} 지방족, $-CH_2Ph$, $-O(CH_2)_{0-1}Ph$, 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5 내지 6원 포화된, 부분 불포화된 또는 아릴 환이고, 또는 상기 정의에도 불구하고, R° 의 두 개의 독립적인 발생은 이들의 개재 원자(들)와 함께 이하 정의된 바와 같이 치환될 수 있는, 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 3 내지 12원 포화된, 부분적으로 불포화된 또는 아릴 모노- 또는 폴리사이클릭 환을 형성한다.

[0050]

$R^\bullet$ (또는 R° 의 두 개의 독립적인 발생을 이들의 개재 원자와 함께 취함으로써 형성된 환) 상의 적합한 1가 치환체는 독립적으로 할로젠, $-(CH_2)_{0-2}R^\bullet$, $-(\text{할로}R^\bullet)$, $-(CH_2)_{0-2}OH$, $-(CH_2)_{0-2}OR^\bullet$, $-(CH_2)_{0-2}CH(OR^\bullet)_2$; $-O(\text{할로}R^\bullet)$, $-CN$, $-N_3$, $-(CH_2)_{0-2}C(O)R^\bullet$, $-(CH_2)_{0-2}C(O)OH$, $-(CH_2)_{0-2}C(O)OR^\bullet$, $-(CH_2)_{0-4}C(O)N(R^\bullet)_2$; $-(CH_2)_{0-2}SR^\bullet$, $-(CH_2)_{0-2}SH$, $-(CH_2)_{0-2}NH_2$, $-(CH_2)_{0-2}NHR^\bullet$, $-(CH_2)_{0-2}NR^\bullet_2$, $-NO_2$, $-SiR^\bullet_3$, $-OSiR^\bullet_3$, $-C(O)SR^\bullet$, $-(C_{1-4}$ 직쇄 또는 분지된 알킬렌) $C(O)OR^\bullet$, 또는 $-SSR^\bullet$ 이고, 여기서 각각의 $R^\bullet$ 는 치환되지 않거나, "할로"가 선행되는 경우, 단지 하나 이상의 할로젠으로 치환되고, 독립적으로 C_{1-4} 지방족, $-CH_2Ph$, $-O(CH_2)_{0-1}Ph$, 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5 내지 6원 포화된, 부분적으로 불포화된 또는 아릴 환으로부터 선택된다. R° 의 포화된 탄소 원자 상의 적합한 2가 치환체는 $=O$ 및 $=S$ 를 포함한다.

[0051]

"임의로 치환된" 그룹의 포화된 탄소 원자 상의 적합한 2가 치환체는 $=O$, $=S$, $=NNR^*$, $=NNHC(O)R^*$, $=NNHC(O)OR^*$, $=NNHS(O)_2R^*$, $=NR^*$, $=NOR^*$, $-O(C(R^*))_{2-3}O-$, 또는 $-S(C(R^*))_{2-3}S-$ 를 포함하고, 여기서, R^* 의 각각 독립적인 발생은 수소, 이하 정의된 바와 같이 치환될 수 있는 C_{1-6} 지방족, 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 치환되지 않은 5원 내지 6원 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 아릴 환으로부터 선택된다. "임의로 치환된" 그룹의 인접하는 치환가능한 탄소에 결합된 적합한 2가 치환체는 $-O(CR^*)_{2-3}O-$ 를 포함하고, 여기서 R^* 의 각각의 독립적인 발생은 수소, 이하 정의되는 바와 같이 치환될 수 있는 C_{1-6} 지방족, 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 치환되지 않은 5 내

지 6원 포화된, 부분적으로 불포화된 또는 아릴 환으로부터 선택된다.

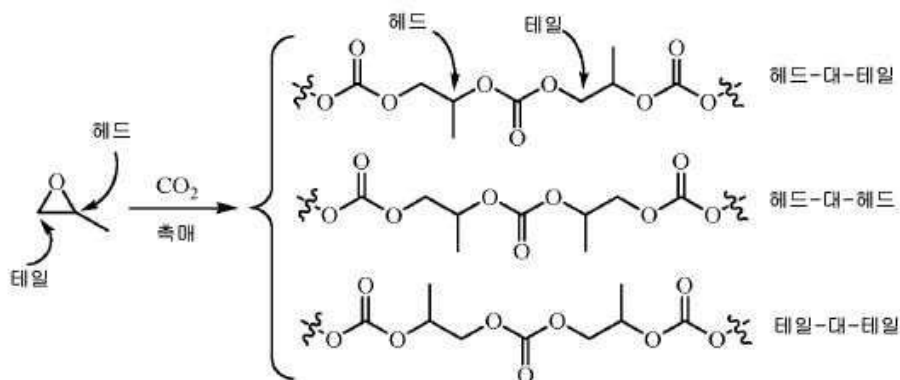
[0052] $R^\bullet$ 의 지방족 그룹 상의 적합한 치환체는 할로젠, $-R^\bullet$, $-(\text{할로}R^\bullet)$, $-OH$, $-OR^\bullet$, $-O(\text{할로}R^\bullet)$, $-CN$, $-C(O)OH$, $-C(O)OR^\bullet$, $-NH_2$, $-NHR^\bullet$, $-NR_2^\bullet$, 또는 $-NO_2$ 를 포함하고, 여기서 각각의 $R^\bullet$ 는 치환되지 않거나, "할로"가 선행될 경우, 단지 하나 이상의 할로젠으로 치환되고, 독립적으로 C_{1-4} 지방족, $-CH_2Ph$, $-O(CH_2)_{0-1}Ph$, 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5 내지 6원 포화된, 부분적으로 불포화된 또는 아릴 환이다.

[0053] "임의로 치환된" 그룹의 치환가능한 질소 상의 적합한 치환체는 $-R^+$, $-NR_2^+$, $-C(O)R^+$, $-C(O)OR^+$, $-C(O)C(O)R^+$, $-C(O)CH_2C(O)R^+$, $-S(O)_2R^+$, $-S(O)_2NR_2^+$, $-C(S)NR_2^+$, $-C(NH)NR_2^+$, 또는 $-N(R^+)S(O)_2R^+$ 를 포함하고; 여기서 각각의 R^+ 는 독립적으로 수소, 이하 정의되는 바와 같이 치환될 수 있는 C_{1-6} 지방족, 치환되지 않은 $-OPh$, 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5 내지 6원 포화된, 부분적으로 불포화된, 또는 아릴 환이고, 또는 상기 정의에도 불구하고, R^+ 의 두 개의 독립적인 발생은 이들의 개재 원자(들)와 함께 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 치환되지 않은 3 내지 12원 포화된, 부분적으로 불포화된 또는 아릴 모노- 또는 비사이클릭 환을 형성한다.

[0054] $R^\dagger$ 의 지방족 그룹 상의 적합한 치환체는 독립적으로 할로젠, $-R^\bullet$, $-(\text{할로}R^\bullet)$, $-OH$, $-OR^\bullet$, $-O(\text{할로}R^\bullet)$, $-CN$, $-C(O)OH$, $-C(O)OR^\bullet$, $-NH_2$, $-NHR^\bullet$, $-NR_2^\bullet$ 또는 $-NO_2$ 이고, 여기서 각각의 $R^\bullet$ 는 치환되지 않거나, "할로"가 선행되는 경우, 단지 하나 이상의 할로젠으로 치환되고, 독립적으로 C_{1-4} 지방족, $-CH_2Ph$, $-O(CH_2)_{0-1}Ph$, 또는 질소, 산소 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0 내지 4개의 헤테로원자를 갖는 5 내지 6원 포화된, 부분적으로 불포화된 또는 아릴 환이다.

[0055] 치환체가 본원에서 기술될 경우, 용어 "라디칼" 또는 "임의로 치환된 라디칼"가 때때로 사용된다. 이러한 문맥에서, "라디칼"은 치환체가 결합된 구조에의 결합에 이용가능한 위치를 갖는 잔기 또는 작용 그룹을 의미한다. 일반적으로, 치환체가 치환체이기 보다는 독립적인 중성 분자였을 경우, 결합점은 수소원자를 포함할 것이다. 이러한 맥락에서 용어 "라디칼" 또는 "임의로-치환된 라디칼"은 따라서 "그룹" 또는 "임의로-치환된 그룹"와 상호교환가능하다.

[0056] 본원에 사용된 "용어 헤드-대-테일" 또는 "HT"는 중합체 쇄 중의 인접하는 반복 단위의 위치화학을 의미한다. 예를 들어, 폴리(프로필렌 카보네이트)(PPC)의 문맥에서, 3개의 위치화학적 가능성에 기초하는 용어 헤드-대-테일은 이하 묘사된다:



[0057]

[0058] 용어 헤드-대-테일 비(H:T)는 헤드-대-테일 결합 대 모든 기타 위치화학적 가능성의 합의 비율을 의미한다. 중합체 구조의 묘사와 관련하여 단량체 단위의 특정 위치화학적 배향은 본원에서 중합체 구조의 표시에 제시될 수 있지만, 이는 중합체 구조를 제시된 위치화학적 배열에 제한하는 것을 의도하는 것이 아니라 묘사된 것, 대향 위치화학, 랜덤 혼합물, 이소택틱 물질, 신디오택틱 물질, 라세미체 물질 및/또는 거울상이성질체 풍부 물질 및 다르게 구체화되지 않는 한, 이들 중 임의의 조합을 포함하는 모든 위치화학적 배열을 포함하는 것으로 해석되어야 한다.

[0059] 본원에 사용된 용어 "알콕실화"는 분자 상의 하나 이상의 작용 그룹(일반적으로 작용 그룹은 알콜, 아민 또는 카복실산이지만, 이들로 엄격하게 국한되지 않는다)이 그것에 하이드록시-말단화 알킬 쇠를 첨부함을 의미한다. 알콕실화 화합물은 단일 알킬 그룹을 포함할 수 있거나, 그들은 올리고머성 잔기, 예를 들어, 하이드록실-말단화 폴리에테릴 수 있다. 알콕실화 물질은 작용 그룹을 에폭사이드로 처리함으로써 부모 화합물로부터 유도될 수 있다.

[0060] 본원에 사용된 용어 "이소시아네이트 지수"는 폴리우레탄 조성물 중의 모든 활성 양성자와의 (1:1) 반응을 위한 이론적 양에 대한 과량의 이소시아네이트를 의미하고, 퍼센트로서 표현된다(즉, $1:1 = 100$). 따라서, 이소시아네이트 지수 = $100 \times (\text{사용된 이소시아네이트의 실제량}) / (\text{필요한 이소시아네이트의 이론적 양})$

도면의 간단한 설명

[0061] 도 1은 통상의 폴리에스테르 또는 폴리카보네이트 폴리올에 기초하는 접착제 제형과 비교하여 본 발명의 접착제 조성물의 경도 및 인장 강도를 도시한다.

도 2는 통상의 폴리카보네이트 폴리올에 기초하는 접착제 제형과 비교하여 본 발명의 접착제 조성물의 다수의 특성을 나타내는 거미 그래프를 도시한다.

도 3은 본 발명의 접착제 조성물의 일련의 기관에 대한 접착성을 도시한다.

도 4는 통상의 폴리에스테르 또는 폴리카보네이트 폴리올에 기초하는 접착제 제형과 비교하여 본 발명의 접착제 조성물의 승온에서 강도 유지를 도시한다.

도 5는 통상의 폴리에스테르 또는 폴리카보네이트 폴리올에 기초하는 접착제 제형과 비교하여 본 발명의 접착제 조성물의 내용매성을 도시한다.

도 6은 본 발명의 접착제 조성물의 화학적 내성 프로파일을 도시한다.

도 7은 통상의 폴리카보네이트 폴리올에 기초하는 제형과 비교하여 본 발명의 폴리우레탄 조성물의 투명성을 도시한다.

도 8은 본 발명의 몇몇 블렌딩된 접착제 제형의 강도 및 신도를 도시한다.

도 9는 실시예 2의 접착제에 대한 ASTM D412 인장 시험을 도시한다.

도 10은 실시예 5의 접착제에 대한 ASTM D412 인장 시험을 도시한다.

도 11은 실시예 5의 접착제에 대한 ASTM D624-다이 C 인열 시험을 도시한다.

도 12는 실시예 5의 접착제에 대한 ASTM D1938 인열 시험을 도시한다.

도 13은 실시예 6의 PPC-함유 접착제에 대한 박리 시험을 도시한다.

도 14는 PPC 폴리올을 함유하지 않는 실시예 6으로부터 대조군 접착제에 대한 박리 시험을 도시한다.

특정 구현예의 상세한 설명

하나의 국면에서, 본 발명은 우레탄 결합을 통해 가교결합되거나 쇠 연장된 지방족 폴리카보네이트 쇠를 포함하는 중합체 조성물을 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 중합체 조성물은 폴리우레탄 접착제를 포함한다.

폴리우레탄 접착제 제조 및 배합 분야는 충분히 진보된다. 일부 구현예에서, 본원에 제공된 신규 물질은 당해 기술 분야에 익히 공지된 방법에 따라 배합되고, 처리되고/되거나 사용된다. 당해 기술 분야의 지식을 본원의 명세서 및 교시와 결합하여, 숙련가는 본 조성물 및 방법의 변화, 변경 및 적용을 용이하게 이해하고, 이러한 변화는 구체적으로 본원에 포함된다. 다음 참조문헌은 일반적으로 폴리우레탄 접착제의 배합, 제조 및 사용에 대한 정보를 함유하고, 이들 참조문헌 각각의 전문은 본원에 참조로 인용된다.

Polyurethanes: Coatings Adhesives and Sealants, Ulrich Maeier-Westhues, **2007** (ISBN 3-87870-334-1)

The Polyurethanes Book, J. Wiley & Sons, **2003** (ISBN 978-0470850411)

Szycher's Handbook of Polyurethanes, CRC Press LLC, **1999** (ISBN 0-8493-0602-7)

Polyurethane Elastomers: From Morphology to Mechanical Aspects, Springer-Verlag/Wein, **2011** (ISBN 978-3-

7091-0513-9)

Szycher's Handbook of Polyurethanes, CRC Press LLC, 1999 (ISBN 0-8493-0602-7)Polyurethane Handbook, Hanser, 1994 (ISBN 1569901570)

특정 구현예에서, 본 발명의 폴리우레탄 조성물은 두 조성물: 임의로 희석제, 용매, 공반응물 등을 함유하는 하나 이상의 이소시아네이트 화합물을 포함하는 제1 조성물, 및 임의로 추가의 반응물, 용매, 촉매 또는 첨가제를 갖는 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 포함하는 제2 조성물을 결합함으로써 유도된다. 이러한 조성물은 별도로 배합한 다음, 결합하거나, 완성된 폴리우레탄 조성물의 모든 성분을 단일 단계로 결합시킬 수 있다. 이러한 조성물을 충분히 기술하기 전에, 이들이 배합되는 폴리올 및 이소시아네이트를 더 충분히 기술한다.

I. 지방족 폴리카보네이트 폴리올

이 구현예는 본 발명의 조성물을 제조하는데 유용성을 갖는 지방족 폴리카보네이트 폴리올의 일부를 기술한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 조성물은 하나 이상의 에폭사이드 및 이산화탄소의 공중합으로부터 유도된 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 포함한다. 적합한 폴리올의 예뿐만 아니라 그들의 제조방법은 전문이 본원에 참조로 인용된 PCT 공보 제 W02010/028362호에 기재되어 있다.

사용된 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 높은 비율의 반응성 말단 그룹을 갖는다는 것은 본원에 기술된 다수의 구현예에 유리하다. 이러한 반응성 말단 그룹은 통상적으로 하이드록실 그룹이지만, 폴리올이 말단 그룹의 화학을 변형시키기 위해 처리할 경우 기타 반응성 작용 그룹이 존재할 수 있고, 이러한 변형된 물질은 아미노 그룹, 티올 그룹, 알켄 그룹, 카복실레이트 그룹, 이소시아네이트 그룹, 실릴 그룹, 에폭시 그룹 등에서 종결시킬 수 있다. 본 발명의 목적을 위해, 용어 '지방족 폴리카보네이트 폴리올'은 전통적인 하이드록시-말단화 물질뿐만 아니라 이러한 말단 그룹 변형된 조성물 둘 다를 포함한다.

특정 구현예에서, 사용된 폴리카보네이트 폴리올의 말단 그룹의 적어도 90%는 반응성 말단 그룹이다. 특정 구현예에서, 사용된 폴리카보네이트 폴리올의 말단 그룹의 적어도 95%, 적어도 96%, 적어도 97% 또는 적어도 98%는 반응성 말단 그룹이다. 특정 구현예에서, 사용된 폴리카보네이트 폴리올의 말단 그룹의 99% 이상, 99.5% 이상, 99.7% 이상 또는 99.8% 이상은 반응성 말단 그룹이다. 특정 구현예에서, 사용된 폴리카보네이트 폴리올의 말단 그룹의 99.9% 이상은 반응성 말단 그룹이다.

특정 구현예에서, 사용된 폴리카보네이트 폴리올의 말단 그룹의 적어도 90%는 -OH 그룹이다. 특정 구현예에서, 사용된 폴리카보네이트 폴리올의 말단 그룹의 적어도 95%, 적어도 96%, 적어도 97% 또는 적어도 98%는 -OH 그룹이다. 특정 구현예에서, 사용된 폴리카보네이트 폴리올의 말단 그룹의 99% 이상, 99.5% 이상, 99.7% 이상 또는 99.8% 이상은 -OH 그룹이다. 특정 구현예에서, 사용된 폴리카보네이트 폴리올의 말단 그룹의 99.9% 이상은 -OH 그룹이다.

폴리올 조성물의 -OH 말단-그룹 함량을 표현하는 또 하나의 방법은 당해 기술 분야에 익히 공지된 방법을 사용하여 측정된 이의 OH#를 기록하는 것이다. 특정 구현예에서, 본 발명에 사용된 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 약 20을 초과하는 OH#를 갖는다. 특정 구현예에서, 본 발명에 사용된 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 약 40을 초과하는 OH#를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 약 50 초과, 약 75 초과, 약 100 초과 또는 약 120 초과 OH#를 갖는다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올 조성물이 상당한 비율의 1차 하이드록실 말단 그룹을 가질 경우에 유리하다. 폴리(에틸렌 카보네이트)를 포함하는 조성물의 경우 표준이 존재하지만, 치환된 에폭사이드와 CO₂의 공중합으로부터 유도된 폴리올의 경우,쇄 말단의 일부 또는 대부분이 2차 하이드록실 그룹으로 구성되는 것이 통상적이다. 특정 구현예에서, 이러한 폴리올은 1차 -OH 말단 그룹의 비율을 증가시키기 위해 처리한다. 이는 2차 하이드록실 그룹을 에틸렌 옥사이드, 반응성 락톤 등의 시약과 반응시킴으로써 달성될 수 있다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 베타 락톤, 카프로락톤 등으로 처리하여 1차 하이드록실 말단 그룹을 도입한다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 에틸렌 옥사이드로 처리하여 1차 하이드록실 말단 그룹을 도입한다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇄는 이산화탄소와 하나 이상의 에폭사이드의 공중합체를 포함한다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇄는 이산화탄소와 에틸렌 옥사이드와의 공중합체를 포함한다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇄는 이산화탄소와 프로필렌 옥사이드와의 공중합체를 포함한다. 특정 구현

예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 이산화탄소와 1,2-부텐 옥사이드 및/또는 1,2-헥센 옥사이드의 공중합체를 포함한다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 이산화탄소와 사이클로헥센 옥사이드의 공중합체를 포함한다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 이산화탄소와 사이클로펜텐 옥사이드의 공중합체를 포함한다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 이산화탄소와 3-비닐 사이클로헥센 옥사이드의 공중합체를 포함한다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 이산화탄소와 3-에틸 사이클로헥센 옥사이드의 공중합체를 포함한다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는, 이산화탄소 및 에틸렌 옥사이드와, 프로필렌 옥사이드, 1,2-부텐 옥사이드, 2,3-부텐 옥사이드, 사이클로헥센 옥사이드, 3-비닐 사이클로헥센 옥사이드, 3-에틸 사이클로헥센 옥사이드, 사이클로펜텐 옥사이드, 에피클로로하이드린, 글리시딜 에스테르, 글리시딜 에테르, 스티렌 옥사이드, 및 고급 알파 올레핀의 에폭사이드로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 추가의 에폭사이드와의 삼원공중합체를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 삼원공중합체는 하나 이상의 추가의 에폭사이드로부터 유도된 보다 적은 양의 반복 단위와 함께 에틸렌 옥사이드로부터 유도된 대부분의 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 약 50% 내지 약 99.5% 에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 약 60% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 75% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 80% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 85% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 90% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 95% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다..

구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는, 이산화탄소와 프로필렌 옥사이드와, 에틸렌 옥사이드, 1,2-부텐 옥사이드, 2,3-부텐 옥사이드, 사이클로헥센 옥사이드, 3-비닐 사이클로헥센 옥사이드, 사이클로펜텐 옥사이드, 에피클로로하이드린, 글리시딜 에스테르, 글리시딜 에테르, 스티렌 옥사이드, 및 고급 알파 올레핀의 에폭사이드로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 추가의 에폭사이드와의 공중합체를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 삼원공중합체는 하나 이상의 추가의 에폭사이드로부터 유도된 보다 적은 양의 반복 단위와 함께 프로필렌 옥사이드로부터 유도된 대부분의 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 약 50% 내지 약 99.5% 프로필렌 옥사이드-유도된 반복 단위를함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 60% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 75% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 80% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 85% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 90% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 삼원공중합체는 95% 초과에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 함유한다.

특정 구현예에서, 상기 기술된 중합체 조성물에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 500g/mol 내지 약 250,000g/mol 범위 내의 수평균분자량 (M_n)을 갖는다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 100,000g/mol 미만의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 70,000g/mol 미만의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 50,000g/mol 미만의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 500g/mol 내지 약 40,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 25,000g/mol 미만의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 500g/mol 내지 약 20,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 500g/mol 내지 약 10,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 500g/mol 내지 약 5,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 1,000g/mol 내지 약 5,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 5,000g/mol 내지 약 10,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 500g/mol 내지 약 1,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 1,000g/mol 내지 약 3,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 5,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 4,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카

보네이트 쇠는 약 3,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 2,500g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 2,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 1,500g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 1,000g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 750g/mol의 M_n 을 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 약 500g/mol의 M_n 을 갖는다.

특정 구현예에서, 사용된 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 그들이 협소한 분자량 분포를 가짐을 특징으로 한다. 이는 지방족 폴리카보네이트 중합체의 다분산 지수(PDI)로 표시될 수 있다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 3 미만의 PDI를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 2 미만의 PDI를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 1.8 미만의 PDI를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 1.5 미만의 PDI를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 1.4 미만의 PDI를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 약 1.0 내지 1.2의 PDI를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 약 1.0 내지 1.1의 PDI를 갖는다.

특정 구현예에서, 사용된 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 협소한 PDI를 갖지 않는다. 이는, 예를 들어, 다분산 성 쇠 전이제를 사용하여 에폭사이드 CO_2 공중합을 개시할 경우 또는 상이한 분자량을 갖는 지방족 폴리카보네이트 폴리올 조성물의 다수를 블렌딩할 때의 경우일 수 있다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 3 초과 PDI를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 2 초과 PDI를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 1.8 초과 PDI를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 1.5 초과 PDI를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 조성물은 1.4 초과 PDI를 갖는다.

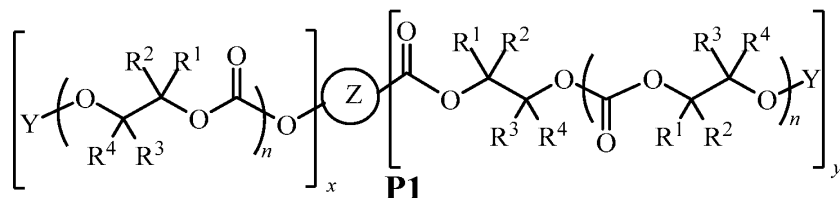
특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 높은 비율의 카보네이트 결합 및 저함량의 에테르 결합을 함유하는 교호 중합체를 실질적으로 포함한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 85% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 90% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 91% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 92% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 93% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 94% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 95% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 96% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 97% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 98% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 99% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 조성물에서 평균 카보네이트 결합 비율이 99.5% 이상임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 상기 비율은 중합 개시제 또는 쇠 전이제에 존재하는 에테르 결합을 제외하고, 단지 에폭사이드 CO_2 공중합 동안 형성된 결합을 의미한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은 그들이 본질적으로 에폭사이드 CO_2 공중합으로부터 유도된 중합체 쇠 내에 또는 중합체에 존재할 수 있는 임의의 중합 개시제, 쇠 전이제 또는 말단 그룹 내에 어떤 에테르 결합도 함유하지 않음을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은, 그들이 평균 조성물 내에 중합체 쇠 당 1개 미만의 에테르 결합을 함유함을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트 조성물은, 그들이 본질적으로 어떤 에테르 결합도 함유하지 않음을 특징으로 한다.

지방족 폴리카보네이트가 일-치환된 에폭사이드(예: 프로필렌 옥사이드, 1,2-부틸렌 옥사이드, 에피클로로하이드린, 에폭사이드화 알파 올레핀 또는 글리시돌 유도체)로부터 유도되는 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트는 그것이 공간규칙적임을 특징으로 한다. 공간규칙성은 중합체 쇠 내에 헤드-대-테일 배열로 배향된 인접한 단량체 단위의 비율로서 표현될 수 있다. 특정 구현예에서, 본 중합체 조성물 중의 지방족 폴리카보네이트 쇠는

약 80%보다 높은 헤드-대-테일 함량을 갖는다. 특정 구현예에서, 헤드-대-테일 함량은 약 85%보다 크다. 특정 구현예에서, 헤드-대-테일 함량은 약 90%보다 크다. 특정 구현예에서, 헤드-대-테일 함량은 약 91% 초과, 약 92% 초과, 약 93% 초과, 약 94% 초과, 또는 약 95% 초과이다. 특정 구현예에서, 중합체의 헤드-대-테일 함량은 양성자 또는 탄소-13 NMR 분광법에 의해 결정된다.

특정 구현예에서, 본 발명의 조성물은 구조 **P1**를 갖는 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 포함한다:



여기서,

R^1 , R^2 , R^3 및 R^4 는 중합체 쇠에서 각각 -H, 불소, 임의로 치환된 C_{1-30} 지방족 그룹, 임의로 치환된 C_{1-40} 헤테로 지방족 그룹 및 임의로 치환된 아릴 그룹으로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서 R^1 , R^2 , R^3 및 R^4 중의 어느 둘 이상은 임의로, 개재 원자들과 함께, 임의로 하나 이상의 헤테로원자를 함유하는 하나 이상의 임의로 치환된 환을 형성하고;

Y는 각각 독립적으로 -H, 반응성 그룹(상기 정의된 바와 같음), 또는 본원에서 부류 및 아부류로 기술된 임의의 쇠 연장성 잔기 또는 이소시아네이트에 대한 부착 부위이고;

n은 각각 독립적으로 약 2 내지 약 50의 정수이고;



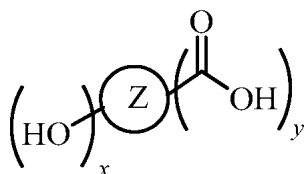
는 결합 또는 다가 잔기이고;

x 및 y는 각각 독립적으로 0 내지 6의 정수이고, 여기서 x 및 y의 합은 2 내지 6이다.



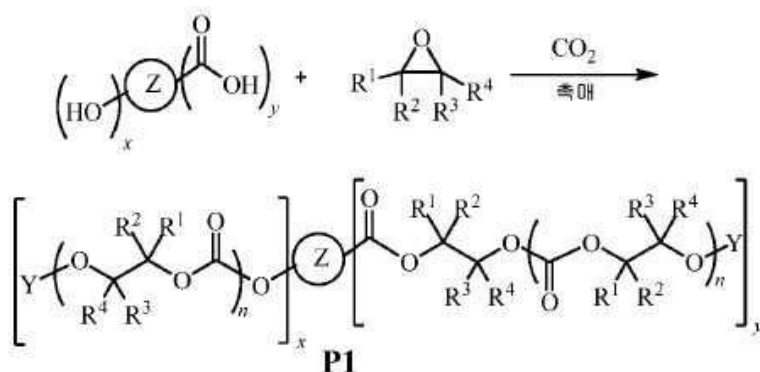
특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠에 매립된 다가 잔기 (Z) 는 에폭사이드/ CO_2 공중합이 발생할 수 있는 둘 이상의 부위를 갖는 다작용성 쇠 전이체로부터 유도된다. 특정 구현예에서, 이러한 공중합은 공개된 PCT 출원 제WO 2010/028362호에 예시된 바와 같은 다작용성 쇠 전이체의 존재하에 실행된다. 특정 구현예에서, 이러한 공중합은 US 제2011/0245424호에 예시된 바와 같이 실행된다. 특정 구현예에서, 이러한 공중합은 문헌(참조: Green Chem.)에 예시된 바와 같이 실행된다 2011, 13, 3469-3475.

특정 구현예에서, 다작용성 쇠 전이체는 다음 화학식을 갖는다:



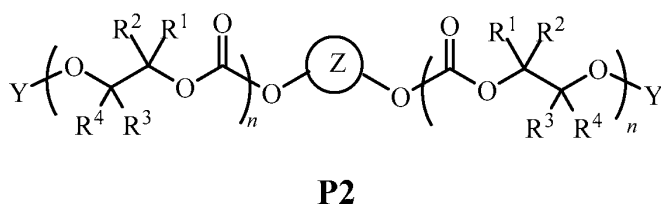
여기서, (Z) , x 및 y는 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 본 중합체 조성물 중의 지방족 폴리카보네이트 쇠는 반응식 2에 도시된 바와 같이 이러한 다작용성 쇠 전이체의 존재하에 하나 이상의 에폭사이드와 이산화탄소의 공중합으로부터 유도된다:



반응식 2

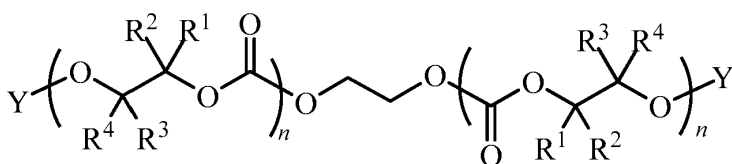
특정 구현예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 지방족 폴리카보네이트 쇠는 구조 **P2**를 갖는 쇠를 포함한다:



여기서, $R^1, R^2, R^3, R^4, Y, \bigcirc_Z$ 및 n 는 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

지방족 폴리카보네이트 쇄가 구조 **P2**를 갖는 특정 구현예에서, **Z**는 2가 알콜로부터 유도된다. 이러한 경우
에, **Z**는 2가 알콜의 탄소-함유 골격을 나타내는 반면, **Z**에 인접한 두 산소원자는 디올의 -OH 그룹으로

부터 유도된다. 예를 들어, 다작용성 쇠 전이제가 에틸렌 글리콜이면, 는 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 이고, **P2**는 다음 구조를 갖는다:



Z 가 2가 알콜로부터 유도되는 특정 구현예에서, 2가 알콜은 C₂₋₄₀ 디올을 포함한다. 특정 구현예에서, 2가 알콜은 1,2-에탄디올, 1,2-프로판디올, 1,3-프로판디올, 1,2-부탄디올, 1,3-부탄디올, 1,4-부탄디올, 1,5-헵탄디올, 2,2-디메틸프로판-1,3-디올, 2-부틸-2-에틸프로판-1,3-디올, 2-메틸-2,4-헵탄 디올, 2-에틸-1,3-헥산 디올, 2-메틸-1,3-프로판 디올, 1,5-헥산디올, 1,6-헥산디올, 1,8-옥탄디올, 1,10-데칸디올, 1,12-도데칸디올, 2,2,4,4-테트라메틸사이클로부탄-1,3-디올, 1,3-사이클로헥탄디올, 1,2-사이클로헥산디올, 1,3-사이클로헥산디올, 1,4-사이클로헥산디올, 1,2-사이클로헥산디메탄올, 1,3-사이클로헥산디메탄올, 1,4-사이클로헥산디메탄올, 1,4-사이클로헥산디에탄올, 이소소르비드, 글리세롤 모노에스테르, 글리세롤 모노에테르, 트리메틸올프로판 모노에스테르, 트리메틸올프로판 모노에테르, 펜타에리트리톨 디에스테르, 펜타에리트리톨 디에테르, 및 이들 중 임의의 알콜실화 유도체로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

⑦ 가 2가 알콜로부터 유도되는 특정 구현예에서, 2가 알콜은 디에틸렌 글리콜, 트리에틸렌 글리콜, 테트라에

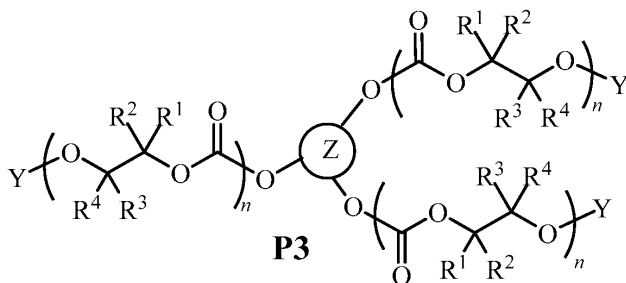
틸렌 글리콜, 고급 폴리(에틸렌 글리콜), 예를 들어, 수평균분자량 220 내지 약 2000g/mol을 갖는 것들, 디프로필렌 글리콜, 트리프로필렌 글리콜, 및 고급 폴리(프로필렌 글리콜), 예를 들어, 수평균분자량 234 내지 약 2000g/mol을 갖는 것들로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

(Z)가 2가 알콜로부터 유도되는 특정 구현예에서, 2가 알콜은 이산, 디올 또는 하이드록시산으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 화합물의 알콕실화 유도체를 포함한다. 특정 구현예에서, 알콕실화 유도체는 에톡실화 또는 프로폭실화 화합물을 포함한다.

(Z)가 2가 알콜로부터 유도되는 특정 구현예에서, 2가 알콜은 중합체성 디올을 포함한다. 특정 구현예에서, 중합체성 디올은 폴리에테르, 폴리에스테르, 하이드록시-말단화 폴리올레핀, 폴리에테르-코폴리에스테르, 폴리에테르 폴리카보네이트, 폴리카보네이트-코폴리에스테르, 폴리옥시메틸렌 중합체 및 이들 중 임의의 알콕실화 유사체로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 중합체성 디올은 약 2000 g/mol 미만의 평균 분자량을 갖는다.

특정 구현예에서, (Z)는 2개 이상의 하이드록시 그룹을 갖는 다가 알콜로부터 유도된다. (Z)가 2개 이상의 하이드록실 그룹을 갖는 다가 알콜로부터 유도되는 구현예에서, 이러한 >2 작용성 폴리올은 2개의 하이드록실 그룹을 갖는 폴리올을 주로 함유하는 폴리올 혼합물의 성분이다. 특정 구현예에서, 이러한 >2 작용성 폴리올은 총 폴리올 혼합물의 20중량% 미만이다. 특정 구현예에서, 이러한 >2 작용성 폴리올은 총 폴리올 혼합물의 10% 미만이다. 특정 구현예에서, 이러한 >2 작용성 폴리올은 총 폴리올 혼합물의 5% 미만이다. 특정 구현예에서, 이러한 >2 작용성 폴리올은 총 폴리올 혼합물의 2% 미만이다. 특정 구현예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 지

방족 폴리카보네이트쇄는 잔기 (Z)가 트리올로부터 유도되는 지방족 폴리카보네이트쇄를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 지방족 폴리카보네이트쇄는 구조 P3를 갖는다:



여기서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y, (Z) 및 n은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

(Z)가 트리올로부터 유도되는 특정 구현예에서, 트리올은 글리세롤, 1,2,4-부탄트리올, 2-(하이드록시메틸)-1,3-프로판디올; 헥산 트리올, 트리메틸올 프로판, 트리메틸올 에탄, 트리메틸올헥산, 1,2,4-사이클로헥산트리메탄올, 펜타에리트리톨 모노 에스테르, 펜타에리트리톨 모노 에테르 및 이들 중 임의의 알콕실화 유사체로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 이러한 알콕실화 유도체는 에톡실화 또는 프로폭실화 화합물을 포함한다.

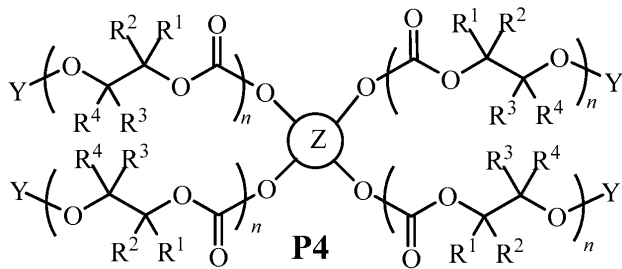
특정 구현예에서, (Z)는 삼작용성 카복실산 또는 삼작용성 하이드록시산의 알콕실화 유도체로부터 유도된다. 특정 구현예에서, 알콕실화 유도체는 에톡실화 또는 프로폭실화 화합물을 포함한다.

(Z)가 중합체성 트리올로부터 유도되는 특정 구현예에서, 중합체성 트리올은 폴리에테르, 폴리에스테르, 하이드록시-말단화 폴리올레핀, 폴리에테르-코폴리에스테르, 폴리옥시메틸렌 중합체 및 이들 중 임의의 알콕실화 유사체로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

드록시-말단화 폴리올레핀, 폴리에테르-코폴리에스테르, 폴리에테르 폴리카보네이트, 폴리옥시메틸렌 중합체, 폴리카보네이트-코폴리에스테르 및 이들 중 임의의 알콕실화 유사체로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 알콕실화 중합체성 트리올은 에톡실화 또는 프로폭실화 화합물을 포함한다.

특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 4개의 하이드록시 그룹을 갖는 다가 알콜로부터 유도된다. 특정 구현예에서, 본 발명

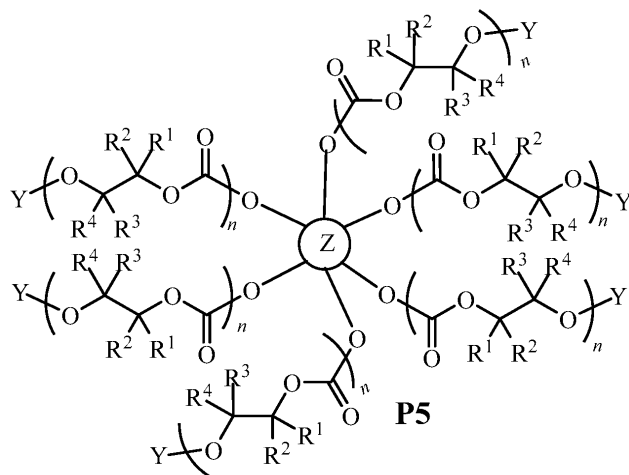
의 중합체 조성물 중의 지방족 폴리카보네이트 쇠는 간기 $\textcircled{Z}$ 가 테트라올로부터 유도되는 지방족 폴리카보네이트 쇠를 포함한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 지방족 폴리카보네이트 쇠는 구조 **P4**를 갖는 쇠를 포함한다:



여기서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y, $\textcircled{Z}$ 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 4개 이상의 하이드록시 그룹을 갖는 다가 알콜로부터 유도된다. 특정 구현예에서,

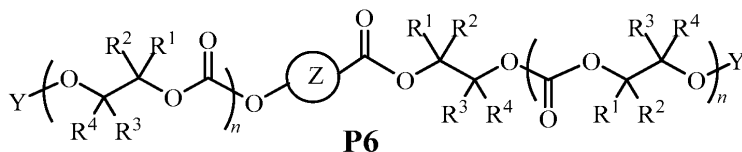
$\textcircled{Z}$ 는 6개의 하이드록시 그룹을 갖는 다가 알콜로부터 유도된다. 특정 구현예에서, 다가 알콜은 디펜타에리트리톨 또는 이의 알콕실화 유사체 또는 기타 유도체이다. 특정 구현예에서, 다가 알콜은 소르비톨 또는 이의 알콕실화 유사체이다. 특정 구현예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 지방족 폴리카보네이트 쇠는 구조 **P5**를 갖는 쇠를 포함한다:



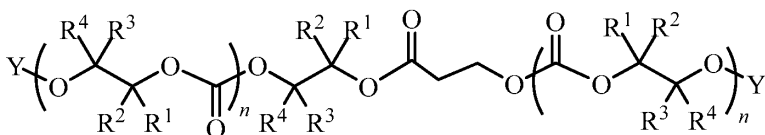
여기서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y, $\textcircled{Z}$ 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 본 발명의 지방족 폴리카보네이트는 고급 작용성 쇠(예: 화학식 **P3** 내지 **P5**의 하나 이상의 폴리카보네이트)와 함께 이작용성 쇠(예: 화학식 **P2**의 폴리카보네이트)의 조합을 포함한다.

특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 하이드록시산으로부터 유도된다. 특정 구현예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 지방족 폴리카보네이트 세는 구조 **P6**를 갖는 세를 포함한다:



여기서, R^1 , R^2 , R^3 , R^4 , Y, $\textcircled{Z}$ 및 n은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다. 이러한 예에서, $\textcircled{Z}$ 는 하이드록시산의 탄소-함유 골격을 나타내는 반면, $\textcircled{Z}$ 에 인접한 에스테르 및 카보네이트 결합은 $-\text{CO}_2\text{H}$ 그룹 및 하이드록시산의 하이드록시 그룹으로부터 유도된다. 예를 들어, $\textcircled{Z}$ 가 3-하이드록시프로판산으로부터 유도되면, $\textcircled{Z}$ 는 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 일 것이고, **P6**은 다음 구조를 갖는다:



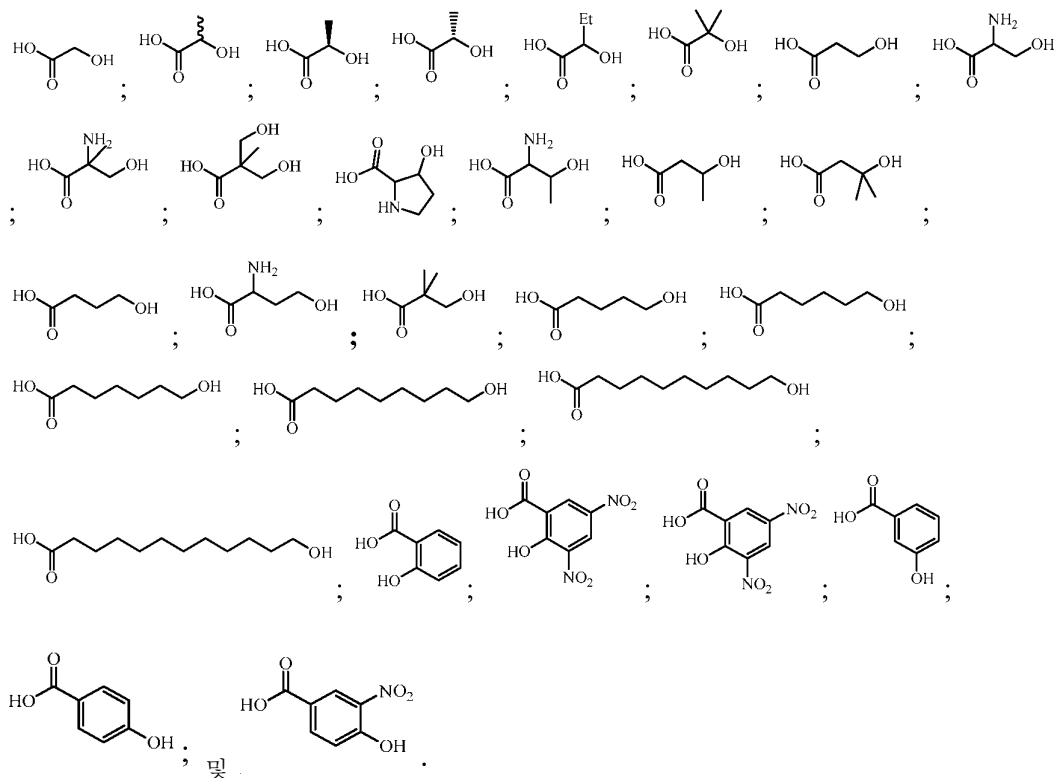
특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 임의로 치환된 C_{2-40} 하이드록시산으로부터 유도된다. 특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 폴리에스테르로부터 유도된다. 특정 구현예에서, 이러한 폴리에스테르는 약 2000g/mol 미만의 분자량을 갖는다..

특정 구현예에서, 하이드록시산은 알파-하이드록시산이다. 특정 구현예에서, 하이드록시산은 글리콜산, DL-락트산, D-락트산, L-락트산, 시트르산 및 만델산으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

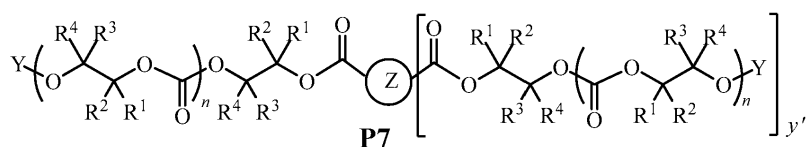
특정 구현예에서, 하이드록시산은 베타-하이드록시산이다. 특정 구현예에서, 하이드록시산은 3-하이드록시프로피온산, DL 3-하이드록시부티르산, D-3 하이드록시부티르산, L-3-하이드록시부티르산, DL-3-하이드록시 발레산, D-3-하이드록시 발레산, L-3-하이드록시 발레산, 살리실산 및 살리실산의 유도체로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

특정 구현예에서, 하이드록시산은 $\alpha-\omega$ 하이드록시산이다. 특정 구현예에서, 하이드록시산은 임의로 치환된 C_{3-20} 지방족 $\alpha-\omega$ 하이드록시산 및 올리고머성 에스테르로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

특정 구현예에서, 하이드록시산은 하기로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

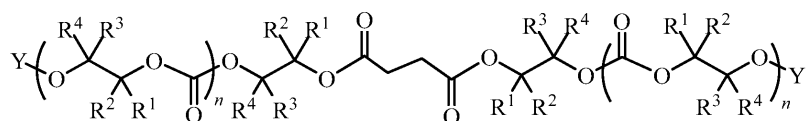


특정 구현예에서, 는 폴리카복실산으로부터 유도된다. 특정 구현예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 지방족 폴리카보네이트 쇠는 구조 P7를 갖는 쇠를 포함하고:



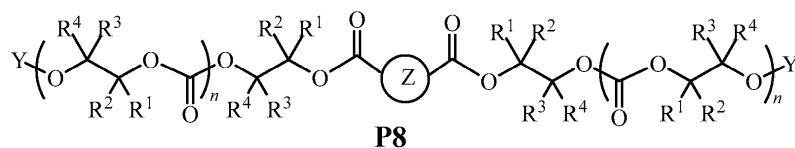
여기서 $R^1, R^2, R^3, R^4, Y,$ 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같고, y '는 1 내지 5를 포함하는 정수이다.

지방족 폴리카보네이트 쇠가 구조 **P7**를 갖는 구현예에서, 는 폴리카복실산의 탄소-함유 골격 (또는 옥살산의 경우 결합)을 나타내는 반면, 에 인접한 에스테르 그룹은 폴리카복실산의 $-CO_2H$ 그룹으로부터 유도된다. 예를 들어, 가 석신산($HO_2CCH_2CH_2CO_2H$)으로부터 유도되면, 는 $-CH_2CH_2-$ 일 것이고, **P7**은 다음 구조를 가질 것이다:



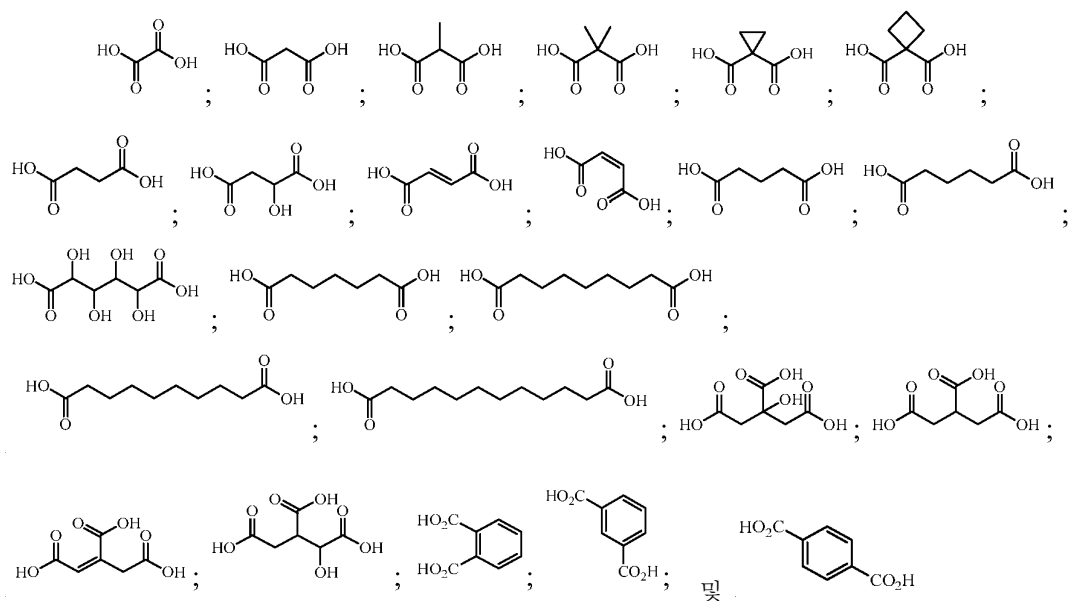
여기서 R^1, R^2, R^3, R^4, Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, **Z**는 디카복실산으로부터 유도된다. 특정 구현예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 지방족 폴리카보네이트 쇠는 구조 **P8**을 갖는 쇠를 포함한다:



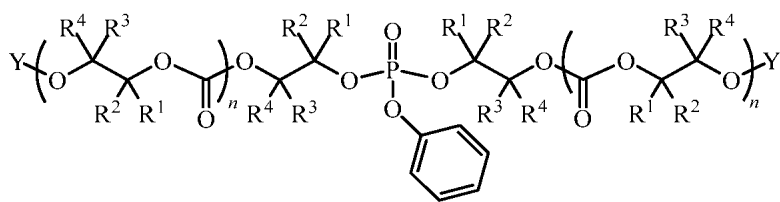
특정 구현예에서, **Z**는 프탈산, 이소프탈산, 테레프탈산, 말레산, 석신산, 말론산, 글루타르산, 아디프산, 피멜산, 수베르산 및 아젤라산으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

특정 구현예에서, $\odot Z$ 는 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 이산으로부터 유도된다:



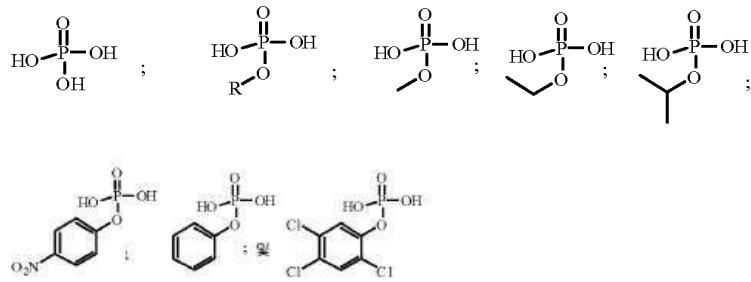
특정 구현예에서, Z 는 인-함유 분자로부터 유도된다. 특정 구현예에서, Z 는 화학식 $-\text{P}(\text{O})(\text{OR})_k$ 를 갖고, 여기서 각각의 R은 독립적으로 임의로 치환된 C1-20 지방족 그룹 또는 임의로 치환된 아릴 그룹이고, k는 0, 1 또는 2이다.

예를 들어, $\textcircled{\text{Z}}$ 가 PhO-P(O)(OH)_2 로부터 유도되면, $\textcircled{\text{Z}}$ 은 $-\text{P(O)(OPh)}-$ 일 것이고, **P7**은 다음 구조를 가질 것이다:

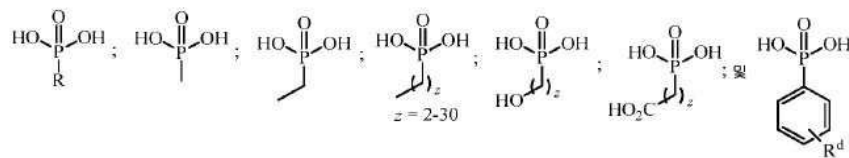


여기서, R^1, R^2, R^3, R^4, Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 인-함유 분자로부터 유도된다:

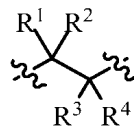


특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 화학식 $-\text{P}(\text{O})(\text{R})-$ 를 갖고, 여기서 R은 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족 그룹 또는 임의로 치환된 아릴 그룹이고, k는 0, 1 또는 2이다. 특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 인-함유 분자로부터 유도된다:

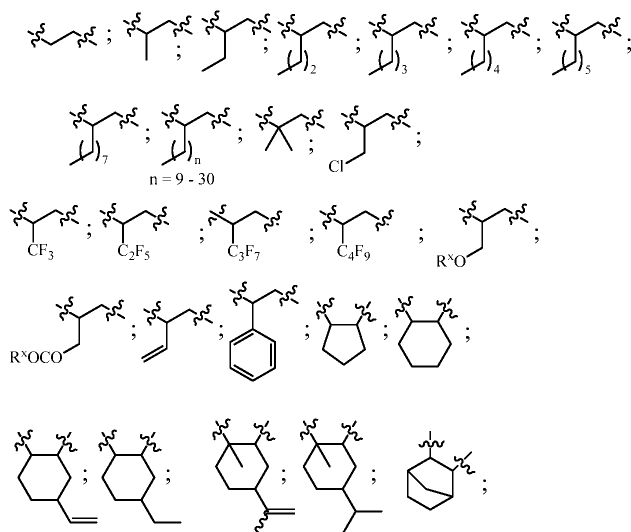


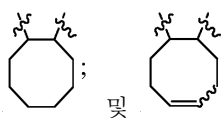
여기서, R 및 R^d 는 각각 상기 및 본원에서 부류 및 아부류에서 정의된 바와 같다.

특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 화학식 $-\text{PR}-$ 을 갖고, 여기서 R은 임의로 치환된 C_{1-20} 지방족 그룹 또는 임의로 치환된 아릴 그룹이다.

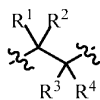


특정 구현예에서, 본원에서 구조물 중의 각각의 $\textcircled{Z}$ 는 다음으로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된다:

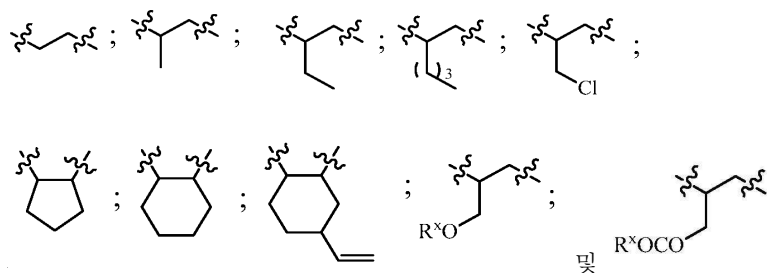




여기서, 각각의 R^x 는 독립적으로 C_{2-20} 지방족, C_{2-20} 헤테로지방족, 3원 내지 14원 카보사이클릭, 6원 내지 10원 아릴, 5원 내지 10원 헤테로아릴 및 3 내지 12원 헤테로사이클릭으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 임의로 치환된 잔기이다.



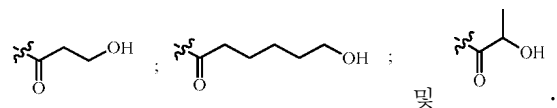
특정 구현예에서, 본원에서 구조물 중의 각각의 R^x 는 다음으로 이루어진 그룹으로부터 독립적으로 선택된다:



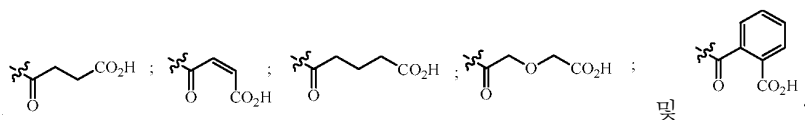
여기서, R^x 는 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 본원에서 구조물 중의 잔기 $-Y$ 는 $-H$ 이다.

특정 구현예에서, $-Y$ 는 $-OH$ 그룹으로 종결된 임의로 치환된 C_{2-40} 링커에 대한 에스테르 결합을 포함한다. 특정 구현예에서, $-Y$ 는 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:

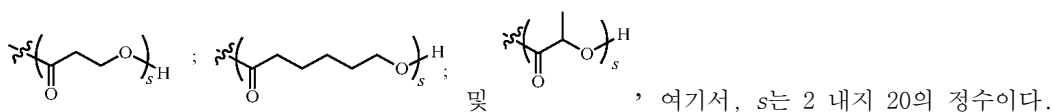


특정 구현예에서, $-Y$ 는 $-CO_2H$ 그룹으로 종결된 임의로 치환된 C_{2-40} 링커에 대한 에스테르 결합을 포함한다. 특정 구현예에서, $-Y$ 는 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:

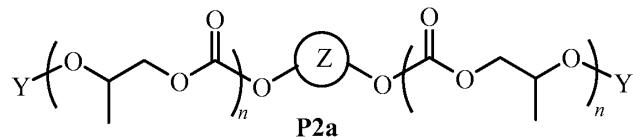


특정 구현예에서, 본원에서 구조물 중의 잔기 $-Y$ 는 하이드록시-말단화 중합체를 포함한다. 특정 구현예에서, $-Y$ 는 하이드록시-말단화 폴리에테르를 포함한다. 특정 구현예에서, $-Y$ 는 $\text{---O---(CH}_2\text{CH}_2\text{O)}_t\text{---H}$ 를 포함하고, 여기서 t 는 1 내지 20의 정수이다.

특정 구현예에서, $-Y$ 는 하이드록시-말단화 폴리에스테르를 포함한다. 특정 구현예에서, $-Y$ 는 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:

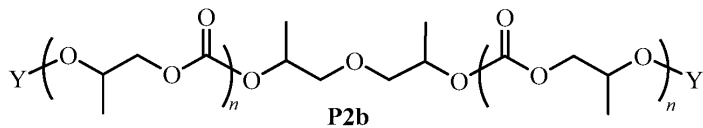


특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



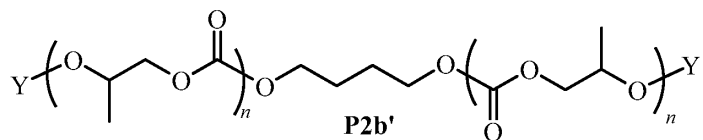
여기서, $\textcircled{Z}$, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



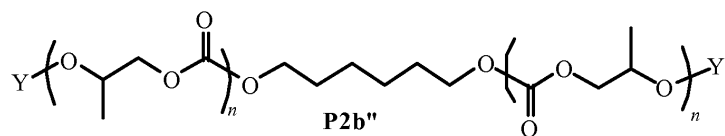
여기서, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



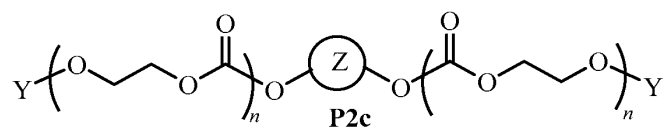
여기서, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



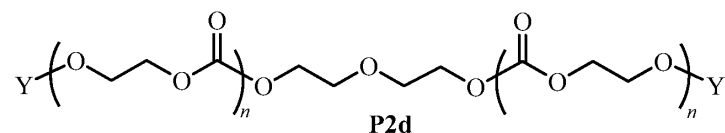
여기서, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



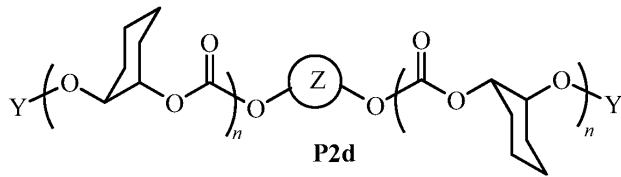
여기서, $\textcircled{Z}$, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



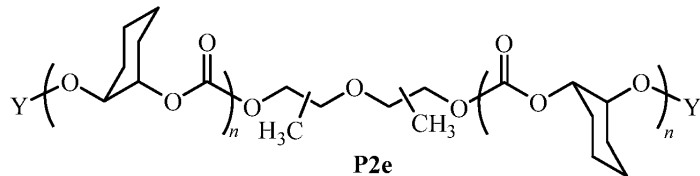
여기서, $\textcircled{Z}$, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



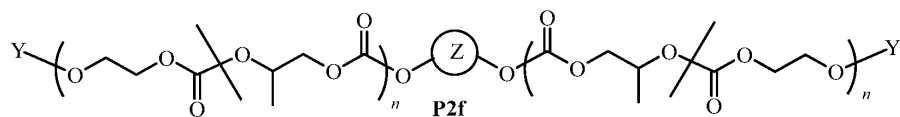
여기서, $\textcircled{Z}$, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



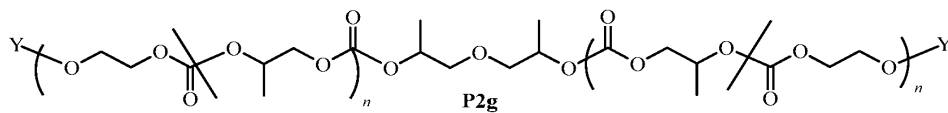
여기서, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



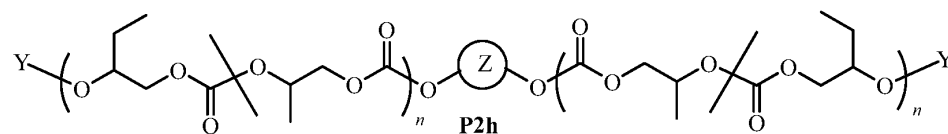
여기서, $\textcircled{Z}$, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



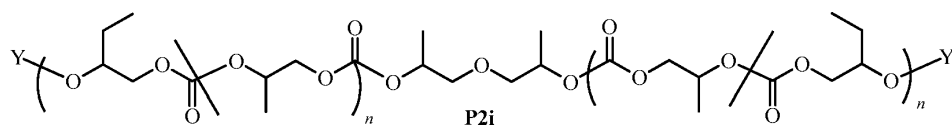
여기서, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



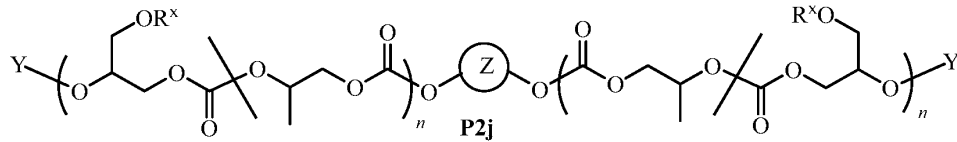
여기서, $\textcircled{Z}$, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트쇄는 다음을 포함한다:



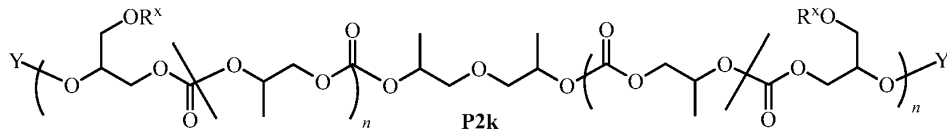
여기서, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



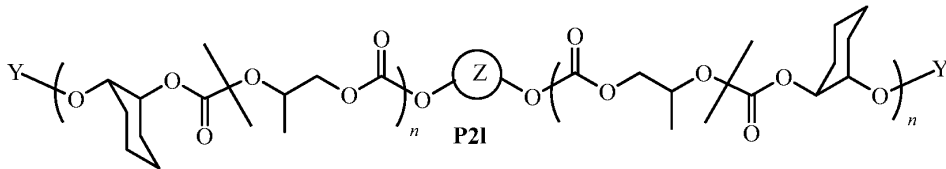
여기서, $\textcircled{Z}$, $-Y$, R^x 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



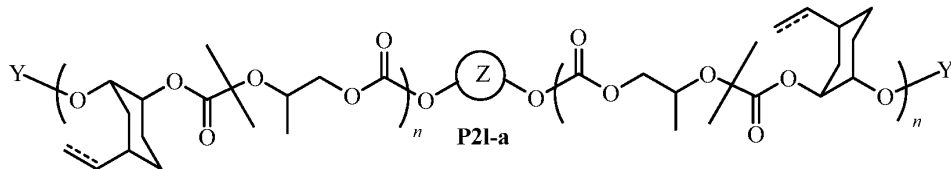
여기서, $-Y$, R^x 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



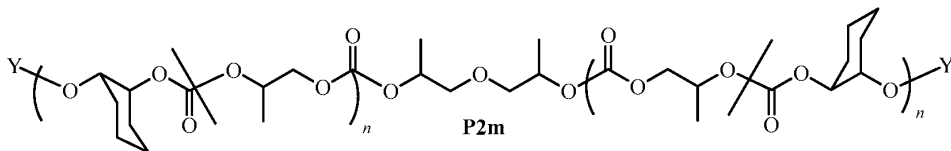
여기서, $\textcircled{Z}$, $-Y$ 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



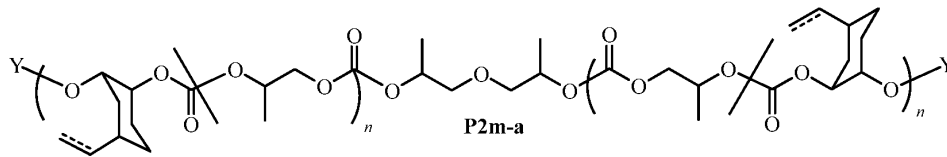
여기서, $\textcircled{Z}$, $-Y$ 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같고, 각각의 $\equiv$ 은 독립적으로 단일 또는 이중 결합을 나타낸다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



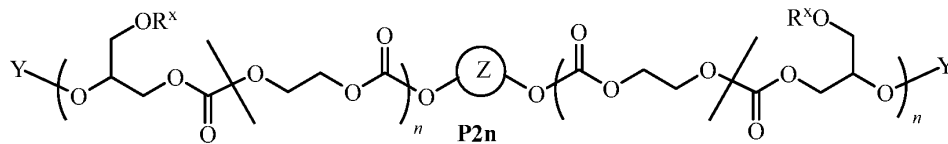
여기서, $-Y$ 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



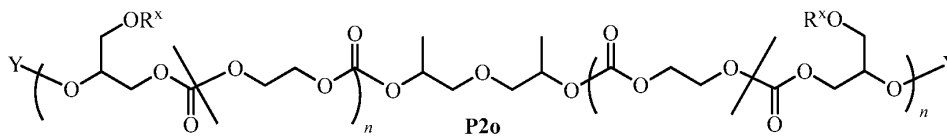
여기서, $-Y$, --- 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



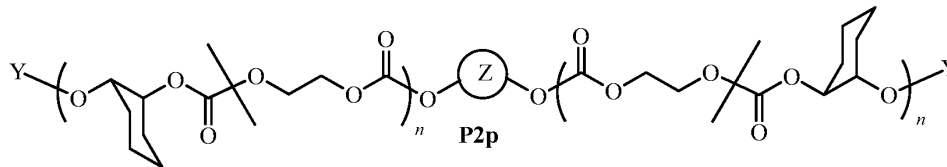
여기서, (Z) , R^x , $-Y$ 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



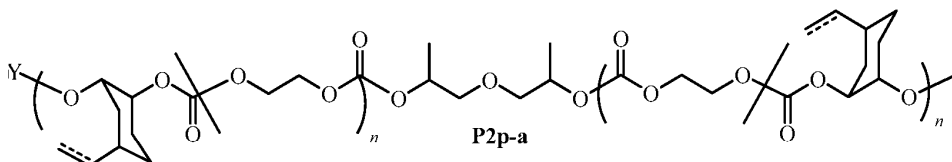
여기서, $-Y$, R^x 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



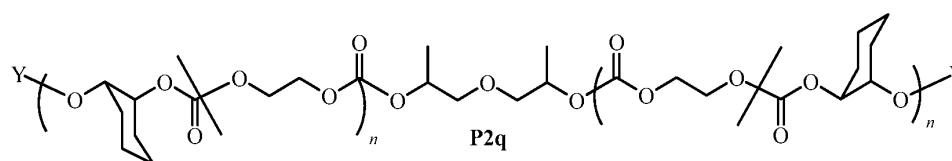
여기서, (Z) , $-Y$ 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



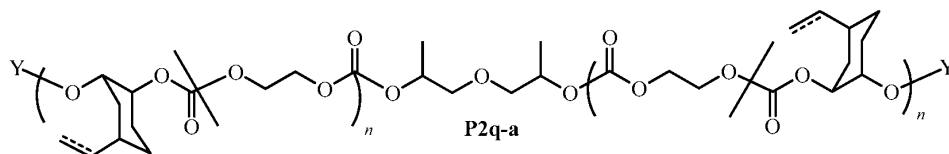
여기서, $-Y$, --- 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



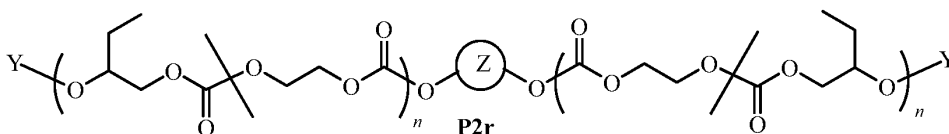
여기서, $-Y$ 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



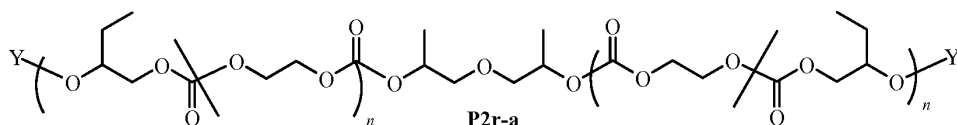
여기서, -Y, $\equiv$ 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



여기서, $\textcircled{Z}$, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 쇠는 다음을 포함한다:



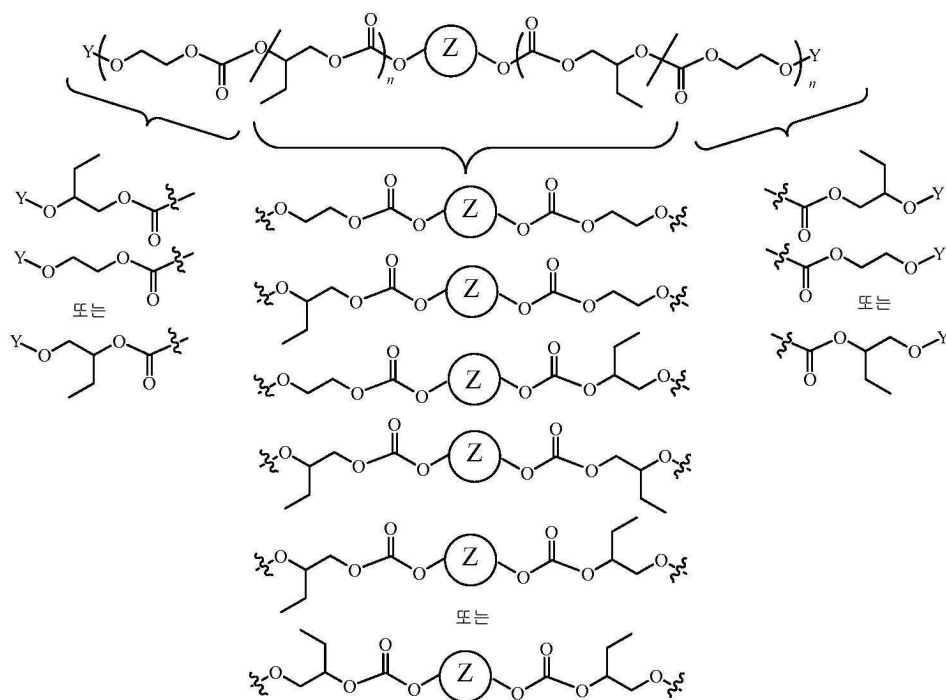
여기서, -Y 및 n 은 각각 상기 정의된 바와 같고, 본원에서 부류 및 아부류에 기술된 바와 같다.

특정 구현예에서, 구조 P2a, P2c, P2d, P2f, P2h, P2j, P2l, P2l-a, P2n, P2p 및 P2r의 폴리카보네이트에서,

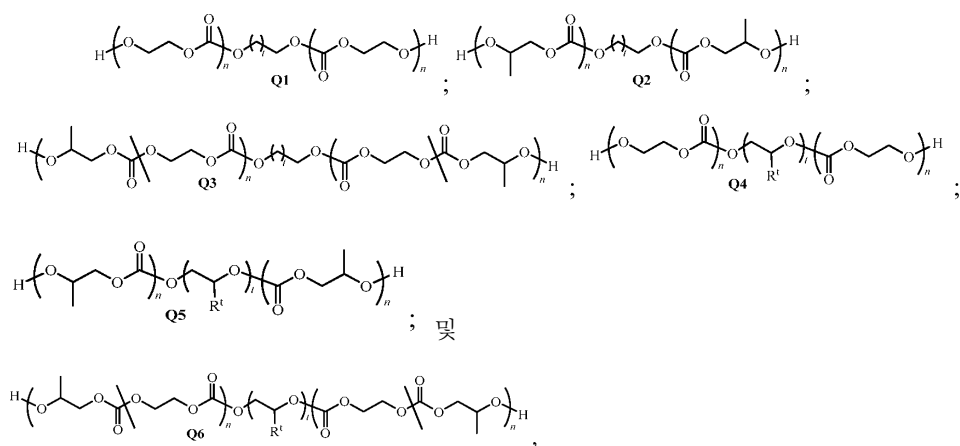
$\textcircled{Z}$ 는 에틸렌 글리콜, 디에틸렌 글리콜, 트리에틸렌 글리콜, 1,3 프로판 디올; 1,4 부탄 디올, 헥실렌 글리콜, 1,6 헥산 디올, 네오펜틸 글리콜, 프로필렌 글리콜, 디프로필렌 글리콜, 트리프로필렌 글리콜 및 이들 중 임의의 알콕실화 유도체로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

특정 구현예에서, 구조 P2a, P2c, P2d, P2f, P2h, P2j, P2l, P2l-a, P2n, P2p 및 P2r의 폴리카보네이트에서, -Y는 -H이다.

두 개 이상의 에폭사이드로부터 유도된 반복 단위를 포함하는 폴리카보네이트, 예를 들어, 상기 묘사된 구조 P2f 내지 P2r-a에 의해 제시된 것들의 경우, 도시된 구조물은 명백하게 묘사되지 않은 위치 이성체 또는 공간 이성체의 혼합물을 나타낼 수 있다는 것이 이해되어야 한다. 예를 들어, 폴리카보네이트 쇠의 말단 그룹에 인접한 중합체 반복 단위는 공중합체를 포함하는 두 에폭사이드 중의 하나로부터 유도될 수 있다. 따라서, 중합체는 말단 그룹에 부착된 특별한 반복 단위로 인출될 수 있지만, 말단 반복 단위는 두 에폭사이드 중의 하나로부터 유도될 수 있고, 제공된 중합체 조성물은 다양한 비로 모든 가능성의 혼합물을 포함할 수 있다. 이러한 말단-그룹의 비는 중합에 사용된 상이한 에폭사이드의 비, 사용된 촉매의 구조, 사용된 반응 조건(즉, 온도 압력 등)을 포함하는 다수의 인자에 의해 뿐만 아니라 반응 성분의 첨가 시기에 의해 영향을 받을 수 있다. 유사하게, 상기 도면은 치환된 에폭사이드로부터 유도된 반복 단위에 대한 규정된 공간화학을 도시할 수 있지만, 중합체 조성물은 몇몇 경우에 공간이성체의 혼합물을 함유한다. 제공된 중합의 공간선택성은 사용된 촉매의 구조 및 사용된 반응 조건을 포함하는 다수의 인자에 의해 영향을 받을 수 있다. 명확하게 하기 위해, 이는 상기 구조 P2r로 제시된 조성물은 이하 다이어그램에 도시된 바와 같은 다수의 화합물의 혼합물을 함유할 수 있다. 이 다이어그램은 이성체를 중합체 P2r에 대해 그래프로 나타내고, 여기서 쇠의 묘사 이하의 구조는 쇠 전이체에 인접한 단량체 단위 및 중합체 주쇄의 각 측면의 말단 그룹에 대해 가능한 각각의 공간 이성체 및 위치 이성체를 나타낸다. 중합체 상의 각 말단 그룹은 독립적으로 좌측 또는 우측에 제시된 그룹으로부터 선택될 수 있고, 쇠 전이체를 포함하는 중합체의 중간 부분 및 이의 두 인접 단량체 단위는 독립적으로 제시된 그룹으로부터 선택될 수 있다. 특정 구현예에서, 중합체 조성물은 이들의 모든 가능한 조합의 혼합물을 포함한다. 기타 구현예에서, 중합체 조성물은 이들 중 하나 이상이 풍부하다.



특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 Q1, Q2, Q3, Q4, Q5, Q6, 및 이들 중 임의의 둘 이상의 혼합물로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.



여기서, t 는 1 내지 12를 포함하는 정수이고, R^t 는 독립적으로 각각 -H 또는 -CH₃이다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:

약 500g/mol 내지 약 3,000g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 적어도 85%의 카보네이트 결합 및 적어도 98%의 -OH 말단 그룹을 갖는 화학식 Q1의 폴리(에틸렌 카보네이트);

약 500g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 적어도 85%의 카보네이트 결합 및 적어도 98%의 -OH 말단 그룹을 갖는 화학식 Q1의 폴리(에틸렌 카보네이트);

약 1,000g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 적어도 85%의 카보네이트 결합 및 적어도 98%의 -OH 말단 그룹을 갖는 화학식 Q1의 폴리(에틸렌 카보네이트);

약 2,000g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 적어도 85%의 카보네이트 결합 및 적어도 98%의 -OH 말단 그룹을 갖는 화학식 Q1의 폴리(에틸렌 카보네이트);

약 3,000g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 적어도 85%의 카보네이트 결합 및 적어도 98%의 -OH 말단 그룹을 갖는 화학식 Q1의 폴리(에틸렌 카보네이트);

약 500g/mol 내지 약 3,000g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 적어도 90%의 카보네이트 결합 및 적어도 98%의 -OH 말단 그룹을 갖는 화학식 Q6의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);

약 500g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 적어도 90%의 카보네이트 결합 및 적어도 98%의 -OH 말단 그룹을 갖는 화학식 Q6의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);

약 1,000g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 적어도 90%의 카보네이트 결합 및 적어도 98%의 -OH 말단 그룹을 갖는 화학식 Q6의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);

약 2,000g/mol의 평균 분자량 수(예를 들어, n 은 평균 약 10 내지 약 11이다), 약 1.25 미만의 다분산 지수, 적어도 90%의 카보네이트 결합 및 적어도 98%의 -OH 말단 그룹을 갖는 화학식 Q6의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);

약 3,000g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 적어도 95%의 카보네이트 결합 및 적어도 98%의 -OH 말단 그룹을 갖는 화학식 Q6의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트); 및

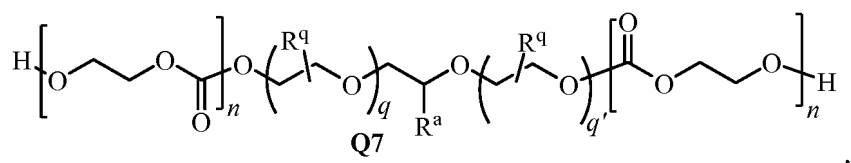
이들 중 임의의 둘 이상의 혼합물.

특정 구현예에서, 매립된 쇠 전이제 $\textcircled{Z}$ 는 중합체성 디올 또는 고급 다가 알콜로부터 유도된 잔기이다. 특정

구현예에서, 이러한 중합체성 알콜은 폴리에테르 또는 폴리에스테르 폴리올이다. 특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 에틸렌 글리콜 또는 프로필렌 글리콜 반복 단위 (-OCH₂CH₂O-, 또는 -OCH₂CH(CH₃)O-) 또는 이들의 조합을 포함하는 폴

리에테르 폴리올이다. 특정 구현예에서, $\textcircled{Z}$ 는 디올과 이산의 반응 생성물을 포함하는 폴리에스테르 폴리올 또는 하나 이상의 락톤의 개환 중합으로부터 유도된 물질이다.

$\textcircled{Z}$ 가 폴리에테르 디올을 포함하는 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 구조 Q7를 갖는다:



여기서,

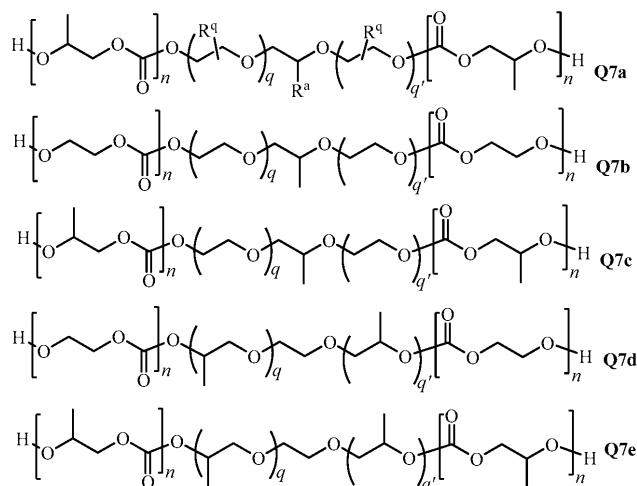
R^q 는 중합체 쇠에서 각각 독립적으로 -H 또는 -CH₃이고;

R^a 는 -H 또는 -CH₃이고;

q 및 q' 는 독립적으로 약 0 내지 약 40의 정수이고;

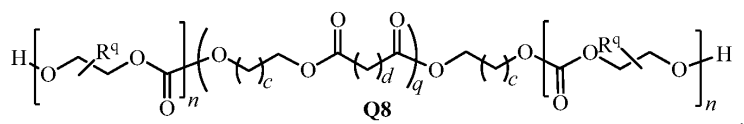
n 은 상기 및 본원에서 실시예 및 구현예에서 정의된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



지방족 폴리카보네이트 폴리올이 구조 Q7에 따르는 화합물을 포함하는 특정 구현예에서, 잔기 Z 는 폴리우레탄 조성물의 배합에 통상적으로 사용되는 것들과 같은 시판되는 폴리에테르 폴리올로부터 유도된다.

Z 가 폴리에스테르 디올을 포함하는 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 구조 Q8를 갖는다:



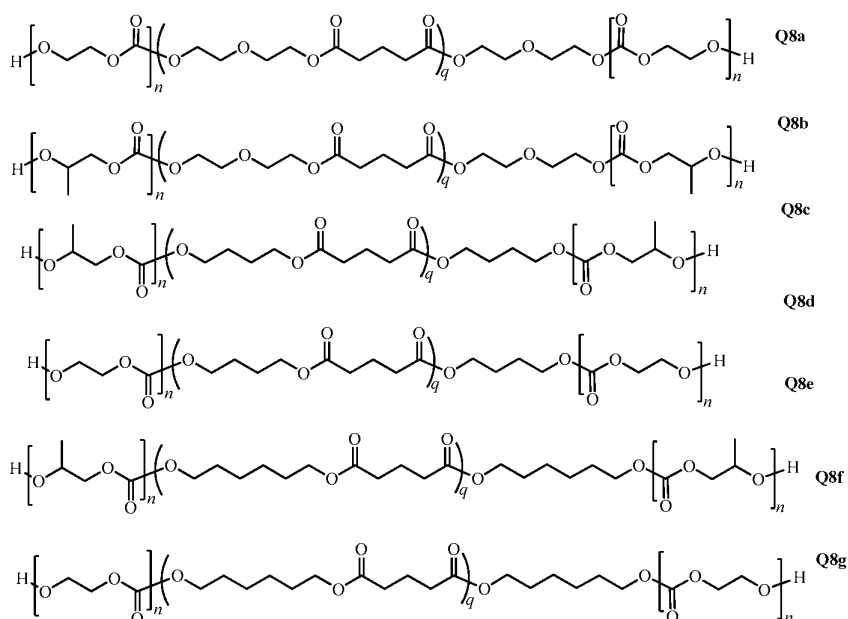
여기서,

c 는 중합체 쇠에서 각각 독립적으로 0 내지 6의 정수이고;

d 는 중합체 쇠에서 각각 독립적으로 1 내지 11의 정수이고;

R^q , n , 및 q 는 각각 상기 및 본원에서 실시예 및 구현예에서 정의된 바와 같다.

특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 다음으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다:



지방족 폴리카보네이트 폴리올이 구조 Q8에 따르는 화합물을 포함하는 특정 구현예에서, 잔기 ^(Z)는 폴리우레탄 조성물의 배합에 통상적으로 사용되는 것들과 같은 시판되는 폴리에스테르 폴리올로부터 유도된다.

II. 이소시아네이트 시약

상기한 바와 같이, 본 발명의 조성물은 이소시아네이트 시약과의 반응으로부터 유도된 고급 중합체를 포함한다. 이러한 이소시아네이트 시약의 목적은 지방족 폴리카보네이트 폴리올 상에서 반응성 말단 그룹과 반응시켜쇄연장 및/또는 가교결합을 통해 고분자량 구조물을 형성하는 것이다.

폴리우레탄 합성 기술은 충분히 진전되고, 매우 많은 수의 이소시아네이트 및 관련 폴리우레탄 전구체가 당해 기술 분야에 공지되어 있다. 명세서의 이 단락은 본 발명의 특정 구현예에서 사용하기에 적합한 이소시아네이트를 기술하지만, 이것이 본 발명의 범위내에서 물질의 추가의 조성물을 배합하기 위해 본 명세서의 교시와 함께 다른 이소시아네이트를 사용하는 폴리우레탄 제형의 기술 분야의 숙련가의 능력내인 것으로 이해되어야 한다. 적합한 이소시아네이트 화합물 및 관련 방법의 기술은 문헌(참조: Chemistry and Technology of Polyols for Polyurethanes Ionescu, Mihail 2005 (ISBN 978-1-84735-035-0), 및 H.)에서 찾을 수 있다. 전문이 본원에 참조로 인용된 Ulrich, "Urethane Polymers," Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 1997.

특정 구현예에서, 이소시아네이트 시약은 분자당 둘 이상의 이소시아네이트 그룹을 포함한다. 특정 구현예에서, 이소시아네이트 시약은 디이소시아네이트이다. 기타 구현예에서, 이소시아네이트 시약은 통상적으로 주로 디이소시아네이트의 혼합물의 소수 성분인 고급 폴리이소시아네이트, 예를 들어, 트라이이소시아네이트, 테트라이소시아네이트, 이소시아네이트 중합체 또는 올리고머 등이다. 특정 구현예에서, 이소시아네이트 시약은 지방족 폴리이소시아네이트 또는 지방족 폴리이소시아네이트의 유도체 또는 올리고머이다. 기타 구현예에서, 이소시아네이트는 방향족 폴리이소시아네이트 또는 방향족 폴리이소시아네이트의 유도체 또는 올리고머이다. 특정 구현예에서, 조성물은 상기 형태의 이소시아네이트 중 임의의 둘 이상의 혼합물을 포함할 수 있다.

특정 구현예에서, 폴리우레탄 접착제를 생산하는데 유용한 이소시아네이트 시약은 지방족, 지환족 및 방향족 디이소시아네이트 화합물을 포함한다.

적합한 지방족 및 지환족 이소시아네이트 화합물은, 예를 들어, 1,3-트리메틸렌 디이소시아네이트, 1,4-테트라메틸렌 디이소시아네이트, 1,6-헥사메틸렌 디이소시아네이트, 2,2,4-트리메틸헥사메틸렌 디이소시아네이트, 2,4,4-트리메틸헥사메틸렌 디이소시아네이트, 1,9-노나메틸렌 디이소시아네이트, 1,10-데카메틸렌 디이소시아네이트, 1,4-사이클로헥산 디이소시아네이트, 이소포론 디이소시아네이트, 4,4'-디사이클로헥실메탄 디이소시아네이트, 2,2'-디에틸에테르 디이소시아네이트, 수소화 크실릴렌 디이소시아네이트 및 헥사메틸렌 디이소시아네이트-뷰렛을 포함한다.

방향족 이소시아네이트 화합물은, 예를 들어, *p*-페닐렌 디이소시아네이트, 톨릴렌 디이소시아네이트, 크실릴렌 디이소시아네이트, 4,4'-디페닐 디이소시아네이트, 2,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트, 1,5-나프탈렌 디이소시아네이트, 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI), 3,3'-메틸렌디톨릴렌-4,4'-디이소시아네이트, 톨릴렌디이소시아네이트-트리메틸올프로판 부가물, 트리페닐메탄 트라이이소시아네이트, 4,4'-디페닐에테르 디이소시아네이트, 테트라클로로페닐렌 디이소시아네이트, 3,3'-디클로로-4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트 및 트라이이소시아네이트 페닐티오포스페이트를 포함한다.

특정 구현예에서, 사용된 이소시아네이트 화합물은 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트, 1,6-헥사메틸렌 헥사메틸렌 디이소시아네이트 및 이소포론 디이소시아네이트 중의 하나 이상을 포함한다. 특정 구현예에서, 사용된 이소시아네이트 화합물은 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트이다. 상기 언급된 디이소시아네이트 화합물은 단독으로 또는 이의 둘 이상의 혼합물로 사용될 수 있다.

특정 구현예에서, 이소시아네이트 시약은 1,6-헥사메틸아민디이소시아네이트(HDI), 이소포론 디이소시아네이트(IPDI), 4,4'-메틸렌-비스(사이클로헥실이소시아네이트) (H_{12} MDI), 2,4-톨루엔 디이소시아네이트(TDI), 2,6-톨루엔 디이소시아네이트(TDI), 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI), 디페닐메탄-2,4'-디이소시아네이트(MDI), 크실릴렌 디이소시아네이트(XDI), 1,3-비스(이소시아네이트메틸)사이클로헥산(H6-XDI), 2,2,4-트리메틸헥사메틸렌 디이소시아네이트, 2,4,4-트리메틸헥사메틸렌 디이소시아네이트(TMDI), *m*-테트라메틸크실릴렌 디이소시아네이트(TMXDI), *p*-테트라메틸크실릴렌 디이소시아네이트(TMXDI), 이소시아네이트메틸-1,8-옥탄 디이소시아네이트(TIN), 트리페닐메탄-4,4',4'-트리이소시아네이트, 트리스(*p*-이소시아네이트메틸)티오설페이트, 1,3-비스(이소시아네이트메틸)벤젠, 1,4-테트라메틸렌 디이소시아네이트, 트리메틸헥산 디이소시아네이트, 1,6-

헥사메틸렌 디이소시아네이트, 1,4-사이클로헥실 디이소시아네이트, 리신 디이소시아네이트, HDI 알로포네이트 삼량체, HDI 우레트디온 및 HDI-삼량체 및 이들 중 임의의 둘 이상의 혼합물로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

특정 구현예에서, 이소시아네이트 시약은 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트, 1,6-헥사메틸렌 디이소시아네이트 및 이소포론 디이소시아네이트로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 이소시아네이트 시약은 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트이다. 특정 구현예에서, 이소시아네이트 시약은 1,6-헥사메틸렌 디이소시아네이트이다. 특정 구현예에서, 이소시아네이트 시약은 이소포론 디이소시아네이트이다.

본 발명의 특정 구현예에 적합한 이소시아네이트는 다양한 상표명하에 시판되고 있다. 적합한 시판되는 이소시아네이트의 예는 상표명: 데스모두르(Desmodur®)(바이엘 머티리얼 사이언스(Bayer Material Science)), 톨로네이트(Tolonate®)(퍼스토르프(Perstorp)), 타케네이트(Takenate®) (타케다(Takeda)), 베스타나트(Vestanat®)(에보닉(Evonik)), 데스모썸(Desmotherm®)(바이엘 머티리얼 사이언스), 베이하이두르(Bayhydur®)(바이엘 머티리얼 사이언스), 몬두르(Mondur®)(바이엘 머티리얼 사이언스), 수프라섹(Suprasec®)(헌츠만 인코포레이티드(Huntsman Inc.)) 하에 시판되는 물질을 포함한다. 루프라네이트(Lupranate®)(바스프(BASF)), 트릭센(Trixene®)(박센덴(Baxenden)), 하르트벤(Hartben®)(베나세도(Benasedo)), 우코폴(Ucopol®)(사피시(Sapici)), 및 바소나트(Basonat®)(바스프(BASF)). 이러한 상표명 각각은 다양한 등급 및 제형에 이용가능한 다양한 이소시아네이트 물질을 포함한다. 특별한 적용을 위한 폴리우레탄 조성물을 생산하기 위한 시약으로서 적합한 시판되는 이소시아네이트 물질의 선택은 상기 언급된 공급업자에 의해 제공된 생성물 데이터 시트에 제공된 정보와 함께 이 특허 출원의 교시 및 명세서를 사용하는 폴리우레탄 코팅 기술 분야의 숙련가의 능력내이다.

본 발명의 특정 구현예에 적합한 추가의 이소시아네이트는 상표명 루프라네이트(Lupranate®)(바스프(BASF))하에 시판된다. 특정 구현예에서, 이소시아네이트는 표 1에 제시된 물질로 이루어진 그룹으로부터, 통상적으로 1.95 내지 2.1 작용성 이소시아네이트인 이 리스트의 서브세트로부터 선택된다:

제품	설명	% NCO	공칭 작용성
Lupranate M	4,4' MDI	33.5	2
Lupranate MS	4,4' MDI	33.5	2
Lupranate MI	2,4' 및 4,4' MDI	33.5	2
Lupranate LP30	액체 순수 4,4' MDI	33.1	2
Lupranate 227	모노머성/ 변형된 MDI 블랜드	32.1	2
카보다이마이드 변형된 MDI			
Lupranate 5143	카보다이마이드 변형된 4,4' MDI	29.2	2.2
Lupranate MM103	카보다이마이드 변형된 4,4' MDI	29.5	2.2
Lupranate 219	카보다이마이드 변형된 4,4' MDI	29.2	2.2
Lupranate 81	카보다이마이드 변형된 MDI	29.5	2.2
Lupranate 218	카보다이마이드 변형된 MDI	29.5	2.2
폴리머성 MDI (PMDI)			
Lupranate M10	저 작용성 폴리머성	31.7	2.2
Lupranate R2500U	폴리머성 MDI 변종	31.5	2.7
Lupranate M20S	중간 작용성 폴리머성	31.5	2.7
Lupranate M20FB	중간 작용성 폴리머성	31.5	2.7
Lupranate M70L	고 작용성 폴리머성	31	3
Lupranate M200	고 작용성 폴리머성	30	3.1
폴리머성 MID 블랜드 및 유도체			
Lupranate 241	저 작용성 폴리머성	32.6	2.3
Lupranate 230	저 점도 폴리머성	32.5	2.3
Lupranate 245	저 점도 폴리머성	32.3	2.3
Lupranate TF2115	중간 작용성 폴리머성	32.3	2.4
Lupranate 78	중간 작용성 폴리머성	32	2.3
Lupranate 234	저 작용성 폴리머성	32	2.4
Lupranate 273	저 점도 폴리머성	32	2.5
Lupranate 266	저 점도 폴리머성	32	2.5
Lupranate 261	저 점도 폴리머성	32	2.5
Lupranate 255	저 점도 폴리머성	31.9	2.5
Lupranate 268	저 점도 폴리머성	30.6	2.4
MDI 프레폴리머 선택			
Lupranate 5010	고 작용성 프레폴리머	28.6	2.3
Lupranate 223	순수한 MDI의 저 점도 유도체	27.5	2.2
Lupranate 5040	중간 작용성, 저 점도	26.3	2.1
Lupranate 5110	폴리머성 MDI 프레폴리머	25.4	2.3
Lupranate MP102	4,4' MDI 프레폴리머	23	2
Lupranate 5090	특수 4,4' MDI 프레폴리머	23	2.1
Lupranate 5050	중간 작용성, 중간 NCO 프레폴리머	21.5	2.1
Lupranate 5030	특수 MDI 프레폴리머	18.9	NA
Lupranate 5080	2,4'-MDI 강화된 프로폴리머	15.9	2
Lupranate 5060	저 작용성, 고 MW 프레폴리머	15.5	2
Lupranate 279	저 작용성, 특수 프레폴리머	14	2
Lupranate 5070	특수 MDI 프레폴리머	13	2
Lupranate 5020	저 작용성, 저 NCO	9.5	2
블루엔 디이소시아네이트 (TDI)			
Lupranate T80-	80/20:2,4/2,6 TDI	48.3	2
Lupranate T80-	고 산도 TDI	48.3	2
Lupranate 8020	80/20:TDI/폴리머성 MDI	44.6	2.1

표 1

본 발명의 특정 구현예에 적합한 기타 이소시아네이트는 바이엘 머티리얼 사이언스(Bayer Material Science)로부터 이용가능한 상표명 데스모두르(Desmodur®)하에 시판되고 있다. 특정 구현예에서, 이소시아네이트는 표 2에 제시된 물질로 이루어진 그룹으로부터, 통상적으로 1.95 내지 2.1 작용성 이소시아네이트인 이 리스트의 서브세트로부터 선택된다:

상품명	설명
데스모두르(Desmodur®) 2460 M	2,4'-이성체 함량이 높은 단량체성 디페닐메탄 디이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) 44 M	단량체성 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트 (MDI).
데스모두르(Desmodur®) 44 MC	데스모두르 44 MC 플레이크는 단량체성 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트 (MDI)이다.
데스모두르(Desmodur®) BL 1100/1	TDI 를 기초로 하는 차단된 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) BL 1265 MPA/X	TDI 를 기초로 하는 차단된 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) BL 3175 SN	HDI 를 기초로 하는 차단된 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) BL 3272 MPA	HDI 를 기초로 하는 차단된 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) BL 3370 MPA	HDI 를 기초로 하는 차단된 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) BL 3475 BA/SN	HDI / IPDI 를 기초로 하는 지방족 가교결합 스토빙 우레탄 수지
데스모두르(Desmodur®) BL 3575/1 MPA/SN	HDI 를 기초로 하는 차단된 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) BL 4265 SN	IPDI 를 기초로 하는 차단된 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) BL 5375	H 12 MDI 를 기초로 하는 차단된 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) CD-L	데스모두르 CD-L 은 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트를 기초로 하는 변형된 이소시아네이트이다.
데스모두르(Desmodur®) CD-S	데스모두르 CD-S 는 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트를 기초로 하는 변형된 이소시아네이트이다.
데스모두르(Desmodur®) D XP 2725	친수성적으로 변형된 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) DA-L	헥사메틸렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 친수성 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) DN	저휘발성 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) E 1160	톨루엔 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) E 1361 BA	톨루올렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체

데스모두르(Desmodur®) E 1361 MPA/X	톨루엔 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) E 14	톨루엔 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) E 15	톨루엔 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) E 1660	톨루엔 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) E 1750 PR	톨루엔 디이소시아네이트를 기초로 하는 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) E 20100	디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 변형된 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) E 21	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) E 2190 X	디페닐메탄 디이소시아네이트 (MDI)를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) E 22	디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) E 2200/76	데스모두르 E 2200/76 은 이성체를 갖는 (MDI)를 기초로 하는 예비중합체이다.
데스모두르(Desmodur®) E 23	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) E 29	디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) E 305	데스모두르 E 305 는 헥사메틸렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 매우 선형 지방족 NCO 예비중합체이다.
데스모두르(Desmodur®) E 3265 MPA/SN	헥사메틸렌 디이소시아네이트 (HDI)를 기초로 하는 지방족 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) E 3370	헥사메틸렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 지방족 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) E XP 2605	톨루엔 디이소시아네이트 및 디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 폴리이소시아네이트 예비중합체

데스모두르(Desmodur®) E XP 2605	톨루엔 디이소시아네이트 및 디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) E XP 2715	2,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트 (2,4'-MDI) 및 헥사디올 아디페이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) E XP 2723	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) E XP 2726	2,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트 (2,4'-MDI)를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) E XP 2727	디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) E XP 2762	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) H	단량체성 지방족 디이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) HL	톨루일렌 디이소시아네이트/헥사메틸렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족/지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) I	단량체성 지환족 디이소시아네이트.
데스모두르(Desmodur®) IL 1351	톨루엔 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) IL 1451	톨루엔 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) IL BA	톨루엔 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) IL EA	톨루일렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 수지
데스모두르(Desmodur®) L 1470	톨루엔 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) L 67 BA	톨루렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) L 67 MPA/X	톨루렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) L 75	톨루렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) LD	헥사메틸렌 디이소시아네이트 (HDI)를 기초로 하는 저작용성 이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) LS 2424	2,4'-이성체 함량이 높은 단량체성 디페닐메탄 디이소시아네이트

데스모두르(Desmodur®) MT	디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) N 100	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 뷰렛)
데스모두르(Desmodur®) N 3200	지방족 폴리이소시아네이트 (저-점도 HDI 뷰렛)
데스모두르(Desmodur®) N 3300	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) N 3368 BA/SN	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) N 3368 SN	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) N 3386 BA/SN	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) N 3390 BA	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) N 3390 BA/SN	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) N 3400	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 우레트디온)
데스모두르(Desmodur®) N 3600	지방족 폴리이소시아네이트 (저-점도 HDI 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) N 3790 BA	지방족 폴리이소시아네이트 (고작용성 HDI 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) N 3800	지방족 폴리이소시아네이트 (가요성 HDI 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) N 3900	헥사메틸렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 저점도 지방족 폴리이소시아네이트 수지
데스모두르(Desmodur®) N 50 BA/MPA	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 뷰렛)
데스모두르(Desmodur®) N 75 BA	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 뷰렛)
데스모두르(Desmodur®) N 75 MPA	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 뷰렛)
데스모두르(Desmodur®) N 75 MPA/X	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 뷰렛)
데스모두르(Desmodur®) NZ 1	지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) PC-N	데스모두르 PC-N 은 변형된 디페닐-메탄-4,4'-디이소시아네이트 (MDI)이다.
데스모두르(Desmodur®) PF	데스모두르 PF 는 변형된 디페닐-메탄-4,4'-디이소시아네이트 (MDI)이다.
데스모두르(Desmodur®) PL 340, 60 % BA/SN	IPDI 를 기초로 하는 차단된 지방족 폴리이소시아네이트

데스모두르(Desmodur®) PL 350	HDI 를 기초로 하는 차단된 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) RC	에틸 아세테이트 중의 톨루엔 디이소시아네이트 (TDI)의 폴리이소시아나이드의 용액.
데스모두르(Desmodur®) RE	에틸 아세테이트 중의 트리페닐메탄-4,4'-트리이소시아네이트의 용액
데스모두르(Desmodur®) RFE	에틸 아세테이트 중의 트리스(p-이소시아네이토페닐) 티오포스페이트의 용액
데스모두르(Desmodur®) RN	에틸 아세테이트 중의 지방족 및 방향족 NCO 그룹을 갖는 폴리이소시아나이드의 용액.
데스모두르(Desmodur®) T 100	순수한 2,4'-톨루엔 디이소시아네이트 (TDI)
데스모두르(Desmodur®) T 65 N	67:33 비의 2,4- 및 2,6-톨루엔 디이소시아네이트 (TDI)
데스모두르(Desmodur®) T 80	80:20 비의 2,4- 및 2,6-톨루엔 디이소시아네이트 (TDI)
Desmodur® T 80 P	증가하는 함량의 가수분해가능한 염소를 갖는 80:20 비의 2,4- 및 2,6-톨루엔 디이소시아네이트 (TDI)
데스모두르(Desmodur®) VH 20 N	디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) VK	이성체 및 고급 작용성 동족체 (PMDI)를 갖는 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)의 데스모두르 VK 생성물 re 혼합물.
데스모두르(Desmodur®) VKP 79	데스모두르 VKP 79 는 이성체 및 동족체를 갖는 변형된 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)이다.
데스모두르(Desmodur®) VKS 10	데스모두르 VKS 10 은 이성체 및 고급 작용성 동족체(PMDI)를 갖는 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트 (MDI)의 혼합물이다.
데스모두르(Desmodur®) VKS 20	데스모두르 VKS 20 은 이성체 및 고급 작용성 동족체(PMDI)를 갖는 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트 (MDI)의 혼합물이다.
데스모두르(Desmodur®) VKS 20 F	데스모두르 VKS 20 F 는 이성체 및 고급 작용성 동족체(PMDI)를 갖는 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트 (MDI)의 혼합물이다.
데스모두르(Desmodur®) VKS 70	데스모두르 VKS 70 은 이성체 및 동족체를 갖는 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트 (MDI)의 혼합물이다.
데스모두르(Desmodur®) VL	디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) VP LS 2078/2	IPDI 를 기초로 하는 차단된 지방족 폴리이소시아네이트

데스모두르(Desmodur®) VP LS 2086	디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) VP LS 2257	HDI 를 기초로 하는 차단된 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) VP LS 2371	이소포론 디이소시아네이트를 기초로 하는 지방족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) VP LS 2397	데스모두르 VP LS 2397 은 폴리프로필렌 에테르 글리콜 및 디페닐메탄 디이소시아네이트 (MDI)를 기초로 하는 선형 예비중합체이다. 이는 이소시아네이트 그룹을 함유한다.
데스모두르(Desmodur®) W	단량체성 지환족 디이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) W/1	단량체성 지환족 디이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) XP 2404	데스모두르 XP 2404 는 단량체성 폴리이소시아네이트의 혼합물이다
데스모두르(Desmodur®) XP 2406	이소포론 디이소시아네이트를 기초로 하는 지방족 폴리이소시아네이트 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) XP 2489	지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) XP 2505	데스모두르 XP 2505 는 이성체 및 고급 작용성 동족체(PMDI)를 갖는 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)를 기초로 하는 에테르 그룹을 함유하는 예비중합체이다.
데스모두르(Desmodur®) XP 2551	디페닐메탄 디이소시아네이트를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) XP 2565	이소포론 디이소시아네이트를 기초로 하는 저점도 지방족 폴리이소시아네이트 수지.
데스모두르(Desmodur®) XP 2580	헥사메틸렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) XP 2599	에테르 그룹을 함유하고 헥사메틸렌-1,6-디이소시아네이트(HDI)를 기초로 하는 지방족 예비중합체
데스모두르(Desmodur®) XP 2617	데스모두르 XP 2617 은 헥사메틸렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 주로 선형 NCO 예비중합체이다.
데스모두르(Desmodur®) XP 2665	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)를 기초로 하는 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
데스모두르(Desmodur®) XP 2675	지방족 폴리이소시아네이트(고급 작용성 HDI 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) XP 2679	지방족 폴리이소시아네이트(HDI 알로파네이트 삼량체)

데스모두르(Desmodur®) XP 2714	헥사메틸렌 디이소시아네이트를 기초로 하는 실란-작용성 지방족 폴리이소시아네이트
데스모두르(Desmodur®) XP 2730	저점도 지방족 폴리이소시아네이트(HDI 우레트디온)
데스모두르(Desmodur®) XP 2731	지방족 폴리이소시아네이트(HDI 알로파네이트 삼량체)
데스모두르(Desmodur®) XP 2742	변형된 지방족 폴리이소시아네이트(HDI-삼량체)는 SiO ₂ -나노입자를 함유한다

표 2

본 발명의 특정 구현예에 적합한 추가의 이소시아네이트는 상품명 톨로네이트(Tolonate®)(퍼스토르프(Perstorp))하에 시판되고 있다. 특정 구현예에서, 이소시아네이트는 표 3에 제시된 물질로 이루어진 그룹으로부터, 통상적으로 1.95 내지 2.1 작용성 이소시아네이트인 이 리스트의 서브세트로부터 선택된다:

톨로네이트(Tolonate™) D2	방향족 용매 중의 75% 고체에서 공급된 차단된 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) HDB	점성 용매 비함유 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) HDB-LV	용매 비함유 저점도 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) HDB 75 B	메톡시 프로필 아세테이트 중의 75% 고체에서 공급된 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) HDB 75 BX	75% 고체에서 공급된 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) HDT	중간 점도, 용매 비함유 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) HDT-LV	용매 비함유 저점도 지방족 폴리이소시아네이트이다
톨로네이트(Tolonate™) HDT-LV2	용매 비함유 매우 저점도 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) HDT 90	90% 고체에서 공급된, HDI-삼량체(이소시아누레이트)를 기초로 하는 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) HDT 90 B	90% 고체에서 공급된, HDI-삼량체(이소시아누레이트)를 기초로 하는 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) IDT 70 B	70% 고체에서 공급된, HDI-삼량체(이소시아누레이트)를 기초로 하는 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) IDT 70 S	70% 고체에서 공급된, HDI-삼량체(이소시아누레이트)를 기초로 하는 지방족 폴리이소시아네이트
톨로네이트(Tolonate™) X FD 90 B	90% 고체에서 공급된, HDI-삼량체를 기초로 하는 고작용성 신속 건조성 지방족 폴리이소시아네이트

표 3

본 발명의 특정 구현예에 적합한 기타 이소시아네이트는 바이엘 머티리얼 사이언스(Bayer Material Science)로부터 이용가능한 상품명 몬두르(Mondur ®)하에 시판되고 있다. 특정 구현예에서, 이소시아네이트는 표 4에 제시된 물질로 이루어진 그룹으로부터, 통상적으로 1.95 내지 2.1 작용성 이소시아네이트인 이 리스트의 서브세트로부터 선택된다:

상품명	설명
몬두르(MONDUR) 445	TDI/MDI 블랜드 폴리이소시아네이트; 톨루엔 디이소시아네이트 및 중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트의 블랜드; NCO 중량 44.5-45.2%
몬두르 448	변형된 중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI) 예비중합체; NCO 중량 27.7%; 점도 140 mPa•s @ 25 °C; 당량 152; 작용성 2.2
몬두르 489	변형된 중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 31.5%; 점도 700 mPa•s @ 25 °C; 당량 133; 작용성 3.0
몬두르 501	변형된 단량체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); 이소시아네이트-말단화 폴리에스테르 예비중합체; NCO 중량 19.0%; 점도 1,100 mPa•s @ 25 °C; 당량 221; 작용성 2
몬두르 541	중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); 복합 목재 제품용 및 접착제 배합물 중의 원료로서 결합제; NCO 중량 31.5%; 점도 200 mPa•s @ 25 °C
몬두르 582	중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); 복합 목재 제품용 및 접착제 배합물 중의 원료로서 결합제; NCO 중량 31.0%; 점도 200 mPa•s @ 25 °C
몬두르 541-라이트	중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 32.0%; 점도 70 mPa•s @ 25 °C; 당량 131; 작용성 2.5
몬두르 841	변형된 중합체성 MDI 예비중합체; NCO, Wt 30.5%; 산도, Wt 0.02%; 아민 당량 132; 25 °C에서 점도, mPa•s 350; 25 °C에서 비중 1.24; 인화점, PMCC, °F >200
몬두르 1437	변형된 디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); 이소시아네이트-말단화 폴리에테르 예비중합체; NCO 중량 10.0%; 점도 2,500 mPa•s @ 25 °C; 당량 420; 작용성 2
몬두르 1453	변형된 디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); 폴리프로필렌 에테르 글리콜(PPG)을 기초로 하는 이소시아네이트-말단화 폴리에테르 예비중합체; NCO 중량 16.5%; 점도 600 mPa•s @ 25 °C; 당량 254; 작용성 2
몬두르 1515	변형된 중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI) 예비중합체; 특히 장비 산업을 위한 강성 폴리우레탄 발포체의 생산에 사용됨; NCO 중량 30.5%; 점도 350 mPa•s @ 25 °C
몬두르 1522	변형된 단량체성 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); NCO 중량 29.5%; 점도 50 mPa•s @ 25 °C; 당량 143; 작용성 2.2
몬두르 MA-2300	변형된 단량체성 MDI, 알로파네이트-변형된 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); NCO 중량 23.0%; 점도 450 mPa•s @ 25 °C; 당량 183; 작용성 2.0
몬두르 MA 2600	변형된 단량체성 MDI, 알로파네이트-변형된 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); NCO 중량 26.0%; 점도 100 mPa•s @ 25 °C; 당량 162; 작용성 2.0

몬두르 MA 2601	방향족 디이소시아네이트 블렌드, 2,4'-이성체를 함유하는 중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI)와 블렌딩된 알로파네이트-변형된 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI); NCO 중량 29.0%; 점도 60 mPa•s @ 25 °C; 당량 145; 작용성 2.2
몬두르 MA 2603	MDI 예비중합체; 알로파네이트-변형된 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)와 블렌딩된 이소시아네이트-말단화(MDI) 예비중합체; NCO 중량 16.0%; 점도 1,050 mPa•s @ 25 °C; 당량 263; 작용성 2.0
몬두르 MA-2902	변형된 단량체성 MDI, 알로파네이트-변형된 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); NCO 중량 29.0%; 점도 40 mPa•s @ 25 °C; 당량 145; 작용성 2.0
몬두르 MA-2903	변형된 단량체성 MDI; 이소시아네이트-말단화(MDI) 예비중합체; NCO 중량 19.0%; 점도 400 mPa•s @ 25 °C; 당량 221; 작용성 2.0
몬두르 MA-2904	알로파네이트-변형된 MDI 폴리메르 예비중합체; NCO 중량 12.0%; 점도 1,800 mPa•s @ 25 °C; 당량 350; 작용성 2.0
몬두르 MB	고순도 등급 이작용성 이소시아네이트, 디페닐메탄 4,4'-디이소시아네이트; 폴리우레탄 엘라스토머, 접착제, 코팅 및 중간체 폴리우레탄 생성물의 생산에 사용됨; 외관 무색 고체 또는 액체; 비중 @ 50 °C±15.5 1.19; 인화점 202 °C PMCC; 점도 (용융된 형태) 4.1 mPa•S; 벌크 밀도 10 lb./gal (융합됨) 또는 9.93 lb./gal (용융됨); 동결 온도 39 °C
몬두르 MLQ	단량체성 디페닐메탄 디이소시아네이트; 발포체, 캐스트 엘라스토머, 코팅 및 접착제에 사용됨; 외관 담황색 투명 액체, NCO 33.4% wt; 25 °C에서 비중 1.19, 196 °C 인화점, DIN 51758; 11-15 °C 동결 온도
몬두르 MQ	고순도-등급 이작용성 이소시아네이트, 디페닐메탄 4,4'-디이소시아네이트(MDI); 고체 폴리우레탄엘라스토머, 접착제, 코팅의 생산에 및 중간체 폴리우레탄 생성물에 사용됨; 외관 무색 고체 또는 액체; 비중 1.19 @ 50 °C; 인화점 202 °C PMCC; 점도 4.1 mPa•S; 벌크 밀도 10 lb./gal (융합됨) 또는 9.93 lb./gal (용융됨); 동결 온도 39 °C
몬두르 MR	중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 31.5%; 점도 200 mPa•s @ 25 °C; 당량 133; 작용성 2.8
몬두르 MR 라이트	중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 31.5%; 점도 200 mPa•s @ 25 °C; 당량 133; 작용성 2.8
몬두르 MR-5	중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 32.5%; 점도 50 mPa•s @ 25 °C; 당량 129; 작용성 2.4
몬두르 MRS	2,4' 풍부 중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 31.5%; 점도 200 mPa•s @ 25 °C; 당량 133; 작용성 2.6

몬두르 MRS 2	2,4' 풍부 중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 33.0%; 점도 25 mPa•s @ 25 °C; 당량 127; 작용성 2.2
몬두르 MRS-4	2,4' 풍부 중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 32.5%; 점도 40 mPa•s @ 25 °C; 당량 129; 작용성 2.4
몬두르 MRS-5	2,4' 풍부 중합체성 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 32.3%; 점도 55 mPa•s @ 25 °C; 당량 130; 작용성 2.4
몬두르 PC	변형된 4,4' 디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); NCO 중량 25.8%; 점도 145 mPa•s @ 25 °C; 당량 163; 작용성 2.1
몬두르 PF	변형된 4,4' 디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI) 예비중합체; NCO 중량 22.9%; 점도 650 mPa•s @ 25 °C; 당량 183; 작용성 2
몬두르 TD-65	단량체성 톨루엔 디이소시아네이트(TDI); 2,4 및 2,6 TDI 의 65/35 혼합물; NCO 중량 48%; 점도 3 mPa•s @ 25 °C; 당량 87.5; 작용성 2
몬두르 TD-80 등급 A	단량체성 톨루엔 디이소시아네이트(TDI); 2,4 및 2,6 이성체의 80/20 혼합물; NCO 중량 48%; 점도 5 mPa•s @ 25 °C; 당량 87.5; 작용성 2
몬두르 TD-80 등급 A/등급 B	단량체성 톨루엔 디이소시아네이트(TDI); 2,4 및 2,6 이성체의 80/20 혼합물; NCO 중량 48%; 점도 5 mPa•s @ 25 °C; 당량 87.5; 작용성 2

표 4

특정 구현예에서, 상기한 이소시아네이트 조성물의 하나 이상은 폴리우레탄 접착제 제조 분야에 공지된 혼합물의 전형적인 제형으로 제공된다. 이러한 혼합물은 몰 과량의 하나 이상의 이소시아네이트와 반응성 작용 그룹, 예를 들어, 알콜, 아민, 티올, 카복실레이트 등을 포함하는 반응성 분자와의 반응에 의해 형성된 프리폴리머를 포함할 수 있다. 이러한 혼합물은 또한 용매, 계면활성제, 안정화제 및 당해 기술 분야에 공지된 기타 첨가제를 포함할 수 있다.

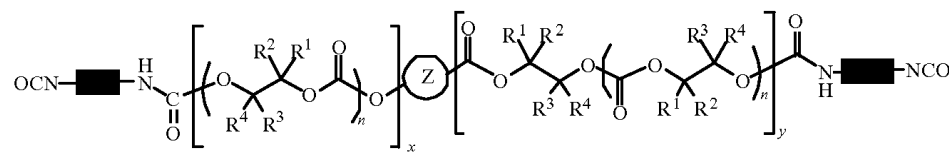
특정 구현예에서, 접착제의 조성물은 차단된 이소시아네이트를 포함할 수 있다. 이러한 혼합물은 표준 조건하에, 심지어 물의 존재하에도 반응하지 않는다. 경화 대신, 가열에 의해 유발된다.

III. 프리폴리머

또 하나의 측면에서, 본 발명은 이소시아네이트-말단화 에폭사이드 CO₂-유도된 폴리올을 포함하는 프리폴리머를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 이소시아네이트-말단화 프리폴리머는 폴리이소시아네이트 화합물과의 반응에 의해 형성된 우레탄 결합을 통해 결합된 다수의 에폭사이드-CO₂-유도된 폴리올 단편을 포함한다.

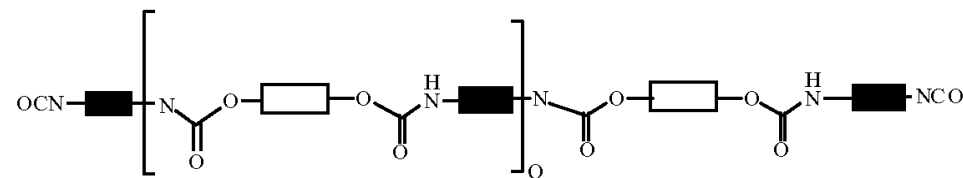
특정 구현예에서, 본 발명의 프리폴리머는 상기한 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올과 본원에 기술된 임의의 하나 이상의 디이소시아네이트의 화학량론적 과량의 반응 결과이다. 이러한 프리폴리머의 중합도(즉, 프리폴리머 쇠에 함유된 폴리올 단편의 평균 수)는 이소시아네이트의 상대적 양뿐만 아니라 시약 첨가 순서 및 반응 조건을 조절함으로써 조작될 수 있다.

특정 구현예에서, 프리폴리머는 다음 화학식에 따르는 화합물을 포함한다:



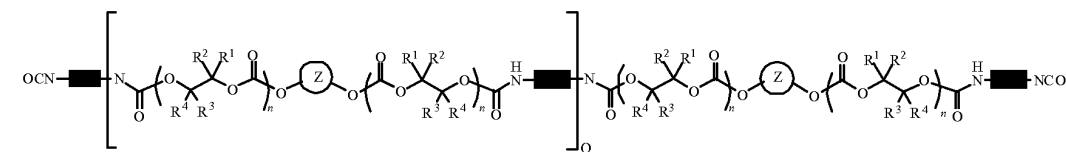
여기서, 검은색 직사각형 $\blacksquare$ 은 디이소시아네이트의 탄소 골격을 나타내고, R¹, R², R³, R⁴, n, x 및 y는 상기 및 본원에서 부류 및 아부류에 정의된 바와 같다.

특정 구현예에서, 프리폴리머는 다음 화학식에 따르는 화합물을 포함하고:



여기서, Q는 0 또는 1 내지 약 50의 정수이고, 각각 열린 직사각형, $\square$ 은 각각이 동일하거나 상이할 수 있는 폴리올 잔기를 나타내고, $\blacksquare$ 는 상기 및 본원에서 부류 및 아부류에 정의된 바와 같다. 이러한 구현예 중의 일부에서, 폴리올 잔기 중의 일부는 본원에서 정의된 바와 같은 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올로부터 유도되고, 폴리올 잔기의 나머지는 기타 폴리올, 예를 들어, 본원에서 기술된 바와 같은 폴리에테르 또는 폴리에스테르 폴리올로부터 유도될 수 있다.

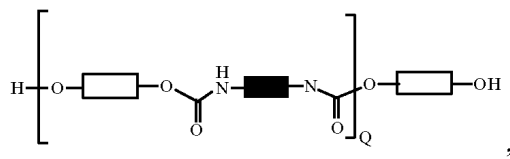
특정 구현예에서, 프리폴리머는 다음 화학식에 따르는 쇠를 포함한다:



여기서, $\blacksquare$, $\bigcirc$, Q, R¹, R², R³, R⁴ 및 n은 상기 및 본원에서 부류 및 아부류에 정의된 바와 같다.

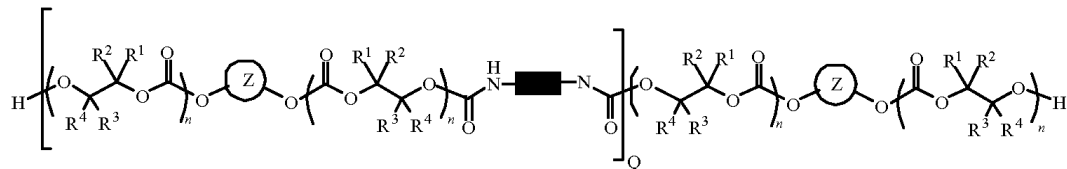
기타 구현예에서, 프리폴리머는 화학량론적 과량의 폴리올을 제한된 양의 이소시아네이트와 반응시킴으로써 형

성시킬 수 있다. 이러한 구현예에서, 본 프리폴리머는 -OH 말단 그룹을 갖고, 우레탄 결합에 의해 결합된 둘 이상의 폴리올 단위를 함유한다. 특정 구현예에서, 이러한 프리폴리머는 다음 구조에 따른다:



여기서, $\square$, $\blacksquare$, 및 Q 는 상기 및 본원에서 부류 및 아부류에 정의된 바와 같다.

특정 구현예에서, 이러한 프리폴리머는 다음에 따르는 구조를 갖고:



여기서, $\blacksquare$, Z , Q , R^1 , R^2 , R^3 , R^4 및 n 은 상기 및 본원에서 부류 및 아부류에 정의된 바와 같다.

IV. 기타 공-반응물 및 첨가제

상기한 바와 같이, 일부 구현예에서, 본 발명의 조성물은 상기 단락 I에 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 포함할 수 있다. 본 발명의 상기 혼합물의 제형에 적합한 추가의 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 WO 제2010/028362호에 기재되어 있다.

특정 구현예에서, 이러한 혼합물은 하나 이상의 추가의 폴리올 및/또는 하나 이상의 첨가제와 함께 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 포함한다. 특정 구현예에서, 추가의 폴리올은 몇몇 경우에 아디프산 및 각종 디올을 기초로 하는 폴리에스테르 폴리올; 폴리에테르 폴리올 및/또는 폴리카프로락톤 폴리올로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 혼합물은 이소시아네이트와의 결합-형성 반응에 참여하는 아민, 알콜, 티올 또는 카복실산과 같은 쇠 연장제로서 공지된 추가의 반응성 소분자를 포함한다. 특정 구현예에서, 첨가제는 용매, 충전제, 점토, 차단제, 안정화제, 텍스토포피, 가소제, 상용화제, 착색제, UV 안정화제, 난연제 등으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

A. 추가의 폴리올

특정 구현예에서, 본 발명의 혼합물은 폴리우레탄 접착제 조성물에 전통적으로 사용되는 것과 같은 하나 이상의 추가의 폴리올과 함께 상기 기술된 바와 같은 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 포함한다. 추가의 폴리올이 존재하는 구현예에서, 그들은 상기 단락 I 및 본원에서 실시예 및 특정 구현예에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올로 제조된 폴리올 혼합물의 균형으로 총 폴리올 함량의 약 95중량% 이하를 포함할 수 있다.

본 발명의 혼합물이 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 및 하나 이상의 추가의 폴리올의 혼합물을 포함하거나 이로부터 유도되는 구현예에서, 추가의 폴리올은 폴리에테르 폴리올, 폴리에스테르 폴리올, 폴리스티렌 폴리올, 폴리에테르-카보네이트 폴리올, 폴리에테르-에스테르 카보네이트, 부탄 디올 아디페이트 폴리올, 에틸렌 글리콜 아디페이트 폴리올, 헥산 디올 아디페이트 폴리올, 폴리카프로락톤 폴리올, 폴리카보네이트 폴리올, 폴리테트라메틸렌 에테르 글리콜(PTMEG) 폴리올, EO/PO 폴리에테르 폴리올 및 이들 중 임의의 둘 이상의 혼합물로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 본 발명의 혼합물은 본원에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올과 상표명 보라놀(Voranol®)(다우(Dow)), 스펙플렉스(SpecFlex®)(다우), 테르카롤(Tercarol®)(다우), 카라돌(Caradol®)(셸(Shell)), 하이퍼리터(Hyperliter®), 아클레임(Acclaim®)(바이엘 머티리얼 사이언스(Bayer Material Science)), 울트라셀(Ultracel®)(바이엘 머티리얼 사이언스), 데스모펜(Desmophen®)(바이엘 머티리얼 사이언스), 아르콜(Arcol®)(바이엘 머티리얼 사이언스), 스테판폴(Stepanpol®)(스테판(Stepan)), 테레이트(Terate®)(인비스타(Invista)), 테롤(Terol®)(옥시드(oxid)), 아그롤(Agrol®)(바이오베이스 테크놀로지스(BioBased Technologies)), BiOH®(카길(Cargil)), HB®(허니 비(Honey Bee)), 폴리신(Polycin®)(베르텔루스(Vertellus)), 폴리(Poly)-BD®(크레이 밸리(Cray Valley)) 및 크라솔(Krasol®)(크레이 밸리)하에 시판되는 물질로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의

기타 폴리올의 혼합물을 포함하거나 이 혼합물로부터 유도된다.

특정 구현예에서, 본 발명의 혼합물은 본원에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올과 함께 폴리 에테르 폴리올, 폴리에스테르 폴리올, 및/또는 폴리카프로락톤 폴리올을 함유한다. 특정 구현예에서, 이러한 폴리 올은, 그들이 약 500 내지 약 10,000 g/mol의 Mn을 가짐을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 이러한 폴리올은 약 500 내지 약 5,000 g/mol의 Mn을 갖는다. 특정 구현예에서, 이러한 폴리올은 약 1,500 내지 약 25,000 g/mol의 Mn을 갖는다.

특정 구현예에서, 본 발명의 혼합물은 본원에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올과 함께 폴리 에테르 폴리올, 폴리에스테르 폴리올 및/또는 폴리카프로락톤 폴리올을 함유한다. 특정 구현예에서, 이러한 폴리 올은, 그들이 1.9 내지 2.5의 작용성을 갖는다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 이러한 폴리올은, 그 들이 1.95 내지 2.2의 작용성을 갖는다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 이러한 폴리올은 2.5 초과와 작용성을 갖고, 이러한 경우에 이러한 고작용성 폴리올은 통상적으로 전체 폴리올 제형의 소수를 손상시킨다. 존재할 수 있는 폴리에스테르 폴리올은 공지된 방법으로 수득될 수 있는 것들을 포함하고, 예를 들어, 폴리에스 테르 폴리올은 아디프산 또는 석신산 (또는 이들의 상응하는 반응성 유도체 또는 무수물)과 부탄디올(BDO), 헥 산디올(HDO) 및 에틸렌 글리콜(EG), 프로판 디올(PDO)을 포함하는 각종 디올과의 반응에 기초할 수 있다.

존재할 수 있는 폴리에테르 폴리올은 공지된 방법으로 수득될 수 있는 것들을 포함하고, 예를 들어, 폴리에테르 폴리올은 촉매로서 알칼리 하이드록사이드, 예를 들어, 수산화나트륨 또는 수산화칼륨 또는 알칼리 알콜레이트, 예를 들어, 나트륨 메틸레이트, 나트륨 에틸레이트 또는 칼륨 에틸레이트 또는 칼륨 이소프로필레이트와의 음이 온성 중합에 의해, 2 내지 8개, 바람직하게는 2개의 반응성 수소를 함유하는 적어도 하나의 개시제 분자를 첨가 하여 또는 알킬렌 라디칼에 2 내지 4개의 탄소를 갖는 하나 이상의 알킬렌 옥사이드로부터 촉매로서 루이스산, 예를 들어, 오염화안티몬, 삼불소화붕소 에테레이트 등, 또는 표백토와의 양이온성 중합에 의해 생성될 수 있다. 임의의 적합한 알킬렌 옥사이드, 예를 들어, 1,3-프로필렌 옥사이드, 1,2- 및 2,3 부틸렌 옥사이드, 아밀 렌 옥사이드, 스티렌 옥사이드 및 바람직하게는 에틸렌 옥사이드 및 1,2-프로필렌 옥사이드 및 이러한 옥사이드 의 혼합물이 사용될 수 있다. 폴리알킬렌 폴리에테르 폴리올은 기타 출발 물질, 예를 들어, 테트라하이드로푸란 및 알킬렌 옥사이드-테트라하이드로푸란 혼합물; 에피할로하이드린, 예를 들어, 에피클로로하이드린 뿐만 아니 라 아르알킬렌 옥사이드, 예를 들어, 스티렌 옥사이드로부터 제조될 수 있다. 폴리알킬렌 폴리에테르 폴리올은, 이러한 그룹들이 보다 느리게 반응하기 때문에, 개시제에 프로필렌 옥사이드를 첨가함으로써 1차 또는 2차 하 이드록실 그룹, 바람직하게는 2차 하이드록실 그룹을 가질 수 있다. 폴리에테르 폴리올 중에는 폴리옥시에틸렌 글리콜, 폴리옥시프로필렌 글리콜, 폴리옥시부틸렌 글리콜, 폴리테트라메틸렌 글리콜, 블록 공중합체, 예를 들 어, 폴리옥시프로필렌과 폴리옥시에틸렌 글리콜, 폴리-1,2-옥시부틸렌 및 폴리옥시에틸렌 글리콜, 폴리-1,4-테 트라메틸렌 및 폴리옥시에틸렌 글리콜의 조합 및 2개 이상의 알킬렌 옥사이드의 블렌드 또는 순차적 첨가로부터 제조된 공중합체 글리콜이 포함된다. 폴리알킬렌 폴리에테르 폴리올은 임의의 공지된 방법, 예를 들어, 인터사 이언스 퍼블리셔스, 인코포레이티드(Interscience Publishers, Inc.)에 의해 발행된 문헌(참조: Wurtz in Encyclopedia of Chemical Technology, Vol. 7, pp. 257-262)에 기술된 방법에 의해 제조될 수 있다. (1951) 또는 미국 특허 제1,922,459호. 바람직한 폴리에테르는 다가 알칼, 예를 들어, 에틸렌 글리콜, 프로필렌 글리콜, 디프로필렌 글리콜, 트리메틸렌 글리콜, 1,2-부탄디올, 1,5-펜탄디올, 1,6-헥산디올, 1,7-헵탄디올, 하 이드로키논, 레조르시놀 글리세롤, 글리세린, 1,1,1-트리메틸올-프로판, 1,1,1-트리메틸올에탄, 펜타에리트리톨, 1,2,6-헥산트리올, α-메틸 글루코사이드, 수크로스 및 소르비톨의 알킬렌 옥사이드 부가 생성 물을 포함한다. 용어 "다가 알콜" 내에는 통상 비스페놀 A로서 공지된, 2,2-비스(4-하이드록시페닐)-프로판과 같은 페놀로부터 유도된 화합물이 또한 포함된다. 알킬렌 옥사이드와 축합될 수 있는 적합한 유기 아민 개시제 는 방향족 아민-예를 들어, 아닐린, N-알킬페닐렌-디아민, 2,4'-, 2,2'-, 및 4,4'-메틸렌디아닐린, 2,6- 또는 2,4-톨루엔디아민, 인접 톨루엔디아민, o-클로로아닐린, p-아미노아닐린, 1,5-디아미노나프탈렌, 메틸렌 디아닐 린, 아닐린과 포름알데히드의 각종 축합 생성물 및 이성체성 디아미노톨루엔; 지방족 아민, 예를 들어, 모노-, 디- 및 트리알칸올아민, 에틸렌 디아민, 프로필렌 디아민, 디에틸렌트리아민, 메틸아민, 트라이소프로판올아민, 1,3-디아미노프로판, 1,3-디아미노부탄 및 1,4-디아미노부탄을 포함한다. 바람직한 아민은 모노에탄올아민, 인 접 톨루엔디아민, 에틸렌디아민 및 프로필렌디아민을 포함한다. 본 발명에서 사용하기 위해 예상되는 또 하나 부류의 방향족 폴리에테르 폴리올은 미국 특허 제 에 기술된 것과 같은 흔히 "만니히" 폴리올로 칭명되는 페놀/ 포름알데히드/알칸올아민 수지의 알킬렌 옥사이드 부가물인 만니히계 폴리올이다. 제4,883,826호; 제4,939,182 호; 및 제5,120, 815호. 추가의 폴리올이 존재하는 특정 구현예에서, 그들은 상기 단락 I 및 본원에서 실시예 및 특정 구현예에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올로 구성된 폴리올 혼합물의 균형으로 총 폴리올 함량의 약 5중량% 내지 약 95중량%를 포함한다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 75중량

% 이하는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 50중량% 이하는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 40중량% 이하, 약 30중량% 이하, 약 25중량% 이하, 약 20중량% 이하, 약 15중량% 이하, 또는 약 10중량% 이하는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 적어도 약 5중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 적어도 약 10중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 적어도 약 15중량%, 적어도 약 20중량%, 적어도 약 25중량%, 적어도 약 40중량% 또는 적어도 약 50중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다.

특정 구현예에서, 존재하는 폴리올의 소수는 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 포함한다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 10중량% 내지 약 50중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 10중량% 내지 약 40중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 10중량% 내지 약 30중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 5중량% 내지 약 20중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 5중량% 내지 약 15중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 5중량% 내지 약 10중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다.

특정 구현예에서, 존재하는 폴리올의 대부분은 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 포함한다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 50중량% 내지 약 90중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 50중량% 내지 약 70중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 80중량% 내지 약 90중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다. 특정 구현예에서, 혼합물의 총 폴리올 함량의 약 90중량% 내지 약 95중량%는 지방족 폴리카보네이트 폴리올이다.

B. 쇠 연장제

특정 구현예에서, 본 발명의 혼합물은 이소시아네이트에 대해 반응성인 하나 이상의 소분자를 포함한다. 특정 구현예에서, 본 혼합물에 포함된 반응성 소분자는 알콜, 아민, 카복실산, 티올 및 이들 중 임의의 둘 이상의 조합으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 하나 이상의 작용 그룹을 갖는 저분자량 유기 분자를 포함한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 혼합물은 하나 이상의 알콜을 포함한다. 특정 구현예에서, 혼합물은 다가 알콜을 포함한다.

특정 구현예에서, 본 혼합물에 포함된 반응성 소분자는 이가 알콜을 포함한다. 특정 구현예에서, 이가 알콜은 C₂₋₄₀ 디올을 포함한다. 폴리올 화합물은 지방족 및 지환족 폴리올 화합물, 예를 들어, 에틸렌 글리콜, 1,2-에탄 디올, 1,2-프로판디올, 1,3-프로판디올, 1,2-부탄디올, 1,2-프로필렌 글리콜, 1,3-부탄 디올, 1,4-부탄 디올, 1,5-펜탄 디올, 1,6-헥산 디올, 1,8-옥탄 디올, 1,9-노난 디올, 1,10-데칸 디올, 네오펜틸 글리콜, 3-메틸-1,5-펜탄 디올, 3,3-디메틸올헥탄, 1,4-사이클로헥산 디올, 1,4-사이클로헥산디메탄올 및 1,4-디하이드록시에틸 사이클로헥산; 및 지방족 및 방향족 폴리아민 화합물, 예를 들어, 에틸렌 디아민, 1,2-프로필렌 디아민, 1,6-헥사메틸렌 디아민, 이소포론 디아민 비스(4-아미노사이클로헥실)메탄, 피페라진 및 메타- 또는 파라-크실렌 디아민; 지방족, 지환족 및 방향족 아미노알콜 화합물, 예를 들어, 2-에탄올아민, N-메틸디에탄올아민, N-페닐디프로판올아민; 하이드록시알킬 설��파미드, 예를 들어, 하이드록시에틸 설��파미드 및 하이드록시에틸아미노에틸 설��파미드; 우레아 및 물로부터 선택된다. 상기 언급된 쇠 연장성 화합물 중에, 바람직하게는 1,4-부탄 디올, 2-에탄올아민 및 1,2-프로필렌디아민이 사용된다. 특정 구현예에서, 쇠 연장제는 1,4-사이클로헥산디에탄올, 이소소르비드, 글리세롤 모노에스테르, 글리세롤 모노에테르, 트리메틸올프로판 모노에스테르, 트리메틸올프로판 모노에테르, 펜타에리트리톨 디에스테르, 펜타에리트리톨 디에테르 및 이들 중 임의의 알콕실화 유도체로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 상기 언급된 쇠 연장성 화합물은 단독으로 또는 이의 둘 이상의 혼합물로 사용될 수 있다.

특정 구현예에서, 본 혼합물에 포함된 반응성 소분자는 디에틸렌 글리콜, 트리에틸렌 글리콜, 테트라에틸렌 글리콜, 고급 폴리(에틸렌 글리콜), 예를 들어, 수평균분자량 220 내지 약 2000 g/mol을 갖는 것들, 디프로필렌 글리콜, 트리프로필렌 글리콜, 및 고급 폴리(프로필렌 글리콜), 예를 들어, 수평균분자량 234 내지 약 2000 g/mol을 갖는 것들로 이루어진 그룹으로부터 선택된 2가 알콜을 포함한다.

특정 구현예에서, 본 혼합물에 포함된 반응성 소분자는 이산, 디올 또는 하이드록시 산으로 이루어진 그룹으로부터 선택된 화합물의 알콕실화 유도체를 포함한다. 특정 구현예에서, 알콕실화 유도체는 에톡실화 또는 프로폭실화 화합물을 포함한다.

특정 구현예에서, 본 혼합물에 포함된 반응성 소분자는 중합체성 디올을 포함한다. 특정 구현예에서, 중합체성 디올은 폴리에테르, 폴리에스테르, 하이드록시-말단화 폴리올레핀, 폴리에테르-코폴리에스테르, 폴리에테르 폴리리카보네이트, 폴리리카보네이트-코폴리에스테르, 및 이들 중 임의의 알콕실화 유사체로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 중합체성 디올은 약 2000 g/mol 미만의 평균 분자량을 갖는다.

특정 구현예에서, 반응성 소분자는 화학식 $(HO)_xQ(COOH)_y$ 를 갖는 하이드록시-카복실산을 포함하고, 여기서 Q는 1 내지 12개의 탄소 원자를 함유하는 직쇄 또는 분지된 탄화수소 라디칼이고, x 및 y 는 각각 1 내지 3의 정수이다. 특정 구현예에서, 공반응물은 디올 카복실산을 포함한다. 특정 구현예에서, 공반응물은 비스(하이드록실알킬)알칸산을 포함한다. 특정 구현예에서, 공반응물은 비스(하이드록실메틸) 알칸산을 포함한다. 특정 구현예에서, 디올 카복실산은 2,2 비스-(하이드록시메틸)-프로판산 (디메틸올프로피온산, DMPA) 2,2-비스(하이드록시메틸) 부탄산 (디메틸올부탄산; DMBA), 디하이드록시석신산 (타르타르산) 및 4,4'-비스(하이드록시페닐) 발레르산으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 공반응물은 N,N-비스(2-하이드록시알킬)카복실산을 포함한다.

특정 구현예에서, 반응성 소분자는 하나 이상의 아미노 그룹을 포함하는 다가 알콜을 포함한다. 특정 구현예에서, 반응성 소분자는 아미노 디올을 포함한다. 특정 구현예에서, 반응성 소분자는 3급 아미노 그룹을 함유하는 디올을 포함한다. 특정 구현예에서, 아미노 디올은 디에탄올아민(DEA), N-메틸디에탄올아민(MDEA), N-에틸디에탄올아민(EDEA), N-부틸디에탄올아민(BDEA), N,N-비스(하이드록시메틸)- α -아미노 피리딘, 디프로판올아민, 디이소프로판올아민(DIPA), N-메틸디이소프로판올아민, 디이소프로판올-p-톨루이딘, N,N-비스(하이드록시메틸)-3-클로로아닐린, 3-디에틸아미노프로판-1,2-디올, 3-디메틸아미노프로판-1,2-디올 및 N-하이드록시에틸피페리딘으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 공반응물은 4급 아미노 그룹을 함유하는 디올을 포함한다. 특정 구현예에서, 4급 아미노 그룹을 포함하는 공반응물은 상기 기술된 임의의 아미노 알콜의 산 염 또는 4급화 유도체이다.

특정 구현예에서, 반응성 소분자는 평균 약 2개 이상의 1급 및/또는 2급 아미노 그룹을 갖는 무기 또는 유기 폴리아민, 폴리알콜, 우레아, 및 이들 중 임의의 둘 이상의 조합으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 반응성 소분자는 디에틸렌 트리아민(DETA), 에틸렌 디아민(EDA), 메타-크실릴렌디아민(MXDA), 아미노에틸 에탄올아민(AEEA), 2-메틸 펜탄 디아민 등, 및 이의 혼합물로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 프로필렌 디아민, 부틸렌 디아민, 헥사메틸렌 디아민, 사이클로헥실렌 디아민, 페닐렌 디아민, 톨릴렌 디아민, 3,3-디클로로벤지덴, 4,4'-메틸렌-비스-(2-클로로아닐린), 3,3-디클로로-4,4'-디아미노 디페닐메탄 및 설포화 1급 및/또는 2급 아민이 본 발명의 실행에 또한 적합하다. 특정 구현예에서, 반응성 소분자는 하이드라진, 치환된 하이드라진, 하이드라진 반응 생성물 등 및 이의 혼합물로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서, 반응성 소분자는 2 내지 12개의 탄소 원자, 바람직하게는 2 내지 8개의 탄소 원자를 갖는 것들을 포함하는 폴리알콜, 예를 들어, 에틸렌 글리콜, 디에틸렌 글리콜, 네오헥틸 글리콜, 부탄디올, 헥산디올 등, 및 이의 혼합물이다. 작합된 우레아는 우레아 및 이의 유도체 등 및 이의 혼합물을 포함한다.

특정 구현예에서, 적어도 하나의 염기성 질소원자를 함유하는 반응성 소분자는 모노-, 비스- 또는폴리알콕실화 지방족, 지환족, 방향족 또는 헤테로사이클릭 1급 아민, N-메틸 디에탄올아민, N-에틸 디에탄올아민, N-프로필 디에탄올아민, N-이소프로필 디에탄올아민, N-부틸 디에탄올아민, N-이소부틸 디에탄올아민, N-올레일 디에탄올아민, N-스테아릴 디에탄올아민, 에톡실화 코코넛 오일 지방 아민, N-알릴 디에탄올아민, N-메틸 디이소프로판올아민, N-에틸 디이소프로판올아민, N-프로필 디이소프로판올아민, N-부틸 디이소프로판올아민, 사이클로헥실 디이소프로판올아민, N,N-디에톡시아닐린, N,N-디에톡실 톨루이딘, N,N-디에톡실-1-아미노피리딘, N,N'-디에톡실 피페라진, 디메틸-비스-에톡실 하이드라진, N,N'-비스-(2-하이드록시에틸)-N,N'-디에틸헥사하이드로 p-페닐렌디아민, N-12-하이드록시에틸 피페라진, 폴리알콕실화 아민, 프로폭실화 메틸 디에탄올아민, N-메틸-N,N-비스-3-아미노프로필아민, N-(3-아미노프로필)-N,N'-디메틸 에틸렌디아민, N-(3-아미노프로필)-N-메틸 에탄올아민, N,N'-비스-(3-아미노프로필)-N,N'-디메틸 에틸렌디아민, N,N'-비스-(3-아미노프로필)-피페라진, N-(2-아미노에틸)-피페라진, N,N'-비스옥시에틸 프로필렌디아민, 2,6-디아미노피리딘, 디에탄올아미노아세트아미드, 디에탄올아미도프로피온아미드, N,N-비스옥시에틸페닐 티오세미카바지드, N,N-비스-옥시에틸메틸 세미카바지드, p,p'-비스-아미노메틸 디벤질 메틸아민, 2,6-디아미노피리딘, 2-디메틸아미노메틸-2-메틸프로파넬, 3-디올로 이루어진 그룹으로부터 선택된다. 특정 구현예에서,쇄 연장체는 2개의 아미노 그룹을 함유하는 화합물이다. 특정 구현예에서,쇄 연장체는 에틸렌 디아민, 1,6-헥사메틸렌 디아민 및 1,5-디아미노-1-메틸-펜탄으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

C. 촉매

특정 구현예에서, 어떤 촉매도 혼합물에 사용되지 않는다. 특정 구현예에서, 폴리우레탄의 중합 반응에서, 아민 화합물 또는 주석 화합물을 포함하는 통상의촉매를 사용하여 반응을 촉진시킬 수 있다. 이러한 구현예는 대부분 통상적으로 폴리우레탄 접착제의 반응성 압출 방법에서 발견된다. 3급 아민 화합물을 포함하는 임의의 적합한 우레탄 촉매가 사용될 수 있고, 유기금속성 화합물이사용될 수 있다. 예시적인 3급 아민 화합물은 트리에틸렌디아민, N-메틸모르폴린, N,N-디메틸사이클로헥실아민, 펜타메틸디에틸렌트리아민, 테트라메틸에틸렌디아민, 1-메틸-4-디메틸아미노에틸피페라진, 3-메톡시-N-디메틸프로필아민, N-에틸모르폴린, 디에틸에탄올아민, N-코코모르폴린, N,N-디메틸-N',N'-디메틸 이소프로필프로필렌디아민, N,N-디에틸-3-디에틸아미노프로필아민 및 디메틸벤질아민을 포함한다. 예시적인 유기금속성 촉매는 유기수은, 유기납, 유기철 및 유기주석 촉매를 포함하고, 이들 중 유기주석 촉매가 바람직하다. 적합한 주석 촉매는 염화제1주석, 카복실산의 주석 염, 예를 들어, 디부틸주석 디라우레이트 뿐만 아니라 기타 유기금속성 화합물, 예를 들어, 미국 특허 제2,846,408호에 기재된 것들을 포함한다. 폴리아소시아누레이트를 유도하는 폴리아소시아네이트의 삼량체화용 촉매, 예를 들어, 알칼리 금속 알콕사이드가 또한 본원에 임의로 사용될 수 있다. 이러한 촉매는 폴리우레탄 또는 폴리아소시아누레이트 형성 속도를 측정가능하게 증가시키는 양으로 사용된다.

본 발명의 혼합물이 촉매를 포함하는 특정 구현예에서, 촉매는 주석계 물질을 포함한다. 특정 구현예에서, 주석 촉매는 디-부틸 주석 디라우레이트, 디부틸비스(라우릴티오)스탄네이트, 디부틸주석비스(이소옥틸머캅토 아세테이트) 및 디부틸주석비스(이소옥틸말레에이트), 주석 옥타노에이트 및 이들 중 임의의 둘 이상의 혼합물로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

특정 구현예에서, 혼합물에 포함된 촉매는 3급 아민을 포함한다. 특정 구현예에서, 혼합물에 포함되는 촉매는 DABCO, 펜타메틸디프로필렌트리아민, 비스(디메틸아미노 에틸 에테르), 펜타메틸디에틸렌트리아민, DBU 페놀 염, 디메틸사이클로헥실아민, 2,4,6-트리스(N,N-디메틸아미노메틸)페놀(DMT-30), 트리아자비사이클로테센(TBD), N-메틸 TBD, 1,3,5-트리스(3-디메틸아미노프로필)헥사하이드로-s-트리아진, 암모늄 염 및 이들 중 임의의 조합 또는 제형으로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

촉매의 통상적인 양은 혼합물 중의 총 폴리올 100부당 촉매 0.001 내지 10부이다. 특정 구현예에서, 제형 중의 촉매 수준은, 사용될 경우, 혼합물에 존재하는 폴리올의 양을 기준으로 하여 약 0.001 phh (백당 중량부) 내지 약 3 phh의 범위이다. 특정 구현예에서, 촉매 수준은 약 0.05 phh 내지 약 1 phh, 또는 약 0.1 phh 내지 약 0.5 phh 범위이다.

D. 일-작용성 물질

특정 구현예에서, 일작용성 성분이 첨가된다. 적합한 일작용성 성분은 알콜, 아민, 카복실 또는 티올과 같은 단 일 이소시아네이트-반응성 작용 그룹을 갖는 분자를 포함할 수 있다. 일작용성 성분은 고급 작용성 중이 사용될 경우, 분자량 또는 가교결합을 제한하기 위해 사용될 수 있는쇄 말단으로서 작용한다. 미국 특허 제5,545,706호는 실질적으로 선형 폴리우레탄 제형에 일작용성 알콜의 사용을 설명한다. 일작용성 알콜은 이소시아네이트와의 반응에 이용가능한 하나의 알콜, 예를 들어, 메탄올, 에탄올, 프로판올, 이소프로판올, 부탄올, 이소부탄올, 펜탄올, 헥산올, 헵탄올, 옥탄올, 노난올, 데칸올, 도데칸올, 페놀 등을 갖는 임의의 화합물일 수 있다. 추가로, 일작용성 성분은 일작용성 알콜에 의해 개시되거나 일작용성 알콜과 반응한 저분자량 중합체로서 첨가될 수 있다. 일작용성 알콜은 나열된 임의의 일작용성 알콜로 개시된 폴리프로필렌 옥사이드 또는 폴리에틸렌 옥사이드와 같은 폴리에테르일 수 있다. 일작용성 알콜은 일작용성 알콜이 제조법에 첨가되는 폴리에스테르 중합체일 수 있다. 일작용성 알콜은 일작용성 음이온, 예를 들어, 할라이드, 니트레이트, 아지드, 카복실레이트 또는 1가 알콜로 개시된 폴리에틸렌 카보네이트 또는 폴리프로필렌 카보네이트와 같은 폴리카보네이트 중합체일 수 있다.

유사하게, 일작용성 성분은 이소시아네이트일 수 있다. 임의의 일작용성 이소시아네이트는 이 동일한 기능을 위해 첨가될 수 있다. 가능한 물질은 페닐 이소시아네이트, 나프틸 이소시아네이트, 메틸 이소시아네이트, 에틸 이소시아네이트, 프로필 이소시아네이트, 부틸 이소시아네이트, 헥실 이소시아네이트, 옥틸 이소시아네이트 등을 포함한다.

E. 첨가제

상기한 성분 이외에, 본 발명의 혼합물은 임의로 폴리우레탄 접착제 기술 분야에 공지된 각종 첨가제를 함유할 수 있다. 이러한 첨가제는 용매, 충전제, 점토, 차단제, 안정화제, 텍스트로피, 가소제, 상용화제, 착색제, UV

안정화제, 난연제 등을 포함할 수 있지만, 이에 국한되지 않는다.

1. 용매

경우에 따라, 폴리우레탄 접착제 또는 프리폴리머는 당해 기술 분야의 숙련자에게 공지된 물 또는 유기 용매를 포함할 수 있는 용매에 분산시킬 수 있다. 적합한 용매는 지방족, 방향족 또는 할로겐화 탄화수소, 에테르, 에스테르, 케톤, 락톤, 실폰, 니트릴, 아미드, 니트로메탄, 프로필렌 카보네이트, 디메틸 카보네이트 등을 포함할 수 있다. 대표적인 예는 아세톤, 아세토니트릴, 벤젠, 부탄올, 부틸 아세테이트, g-부티로락톤, 부틸 카리비틀 아세테이트, 카비톨 아세테이트, 클로로포름, 사이클로헥산, 1,2-디클로로메탄, 이염기성 에스테르, 디글라임, 1,2-디메톡시에탄, 디메틸아세트아미드, 디메틸설폭사이드, 디메트포름아미드, 1,4-디옥산, 에탄올, 에틸 아세테이트, 에틸 에테르, 에틸렌 글리콜, 헥산, 하이드록실메틸 메타크릴레이트, 이소프로필 아세테이트, 메탄올, 메틸 아세테이트, 메틸 아밀 케톤, 메틸 이소부틸 케톤, 메틸렌 클로라이드, 메틸 에틸 케톤, 모노글라임, 메틸 메타크릴레이트, 프로필렌 카보네이트, 프로필렌 옥사이드, 스티렌, 알파-테르피네올, 테트라하이드로푸란, 텍사놀, 톨루엔, 디에틸 석시네이트, 디에틸렌 글리콜 메틸 에테르, 에틸렌 글리콜 디아세테이트, 트리에틸 포스페이트 등을 포함하지만, 이에 국한되지 않는다.

2. 충전제

본 발명의 접착제의 임의의 성분은 충전제를 포함한다. 이러한 충전제는 당해 기술 분야의 숙련자에게 익히 공지되어 있고, 카본 블랙, 이산화티탄, 탄산칼슘, 표면 처리된 실리카, 산화티탄, 발연 실리카, 활석, 알루미늄 삼산화물 등을 포함한다. 특정 구현예에서, 충전제는 카본 블랙을 포함한다. 특정 구현예에서, 하나 이상의 강화성 충전제가 사용될 수 있고, 이중 하나는 카본 블랙이고, 충분한 양의 카본 블랙을 사용하여 접착제에 목적하는 블랙 색상을 제공한다. 특정 구현예에서, 강화성 충전제는 접착제의 강도를 증가시키고/시키거나 접착제에 텍스트로피 특성을 제공하기에 충분한 양으로 사용된다. 충전제 또는 기타 첨가제의 양은 목적하는 적용에 따라 변한다.

3. 점토

접착제 조성물 중의 임의의 물질 중에는 점토가 있다. 본 발명에 유용한 바람직한 점토는 카올린, 표면 처리된 카올린, 하소된 카올린, 규산알루미늄 및표면 처리된 무수 규산알루미늄을 포함한다. 점토는 펄핑가능한 접착제의 배합을 촉진시키는 임의의 형태로 사용될 수 있다. 바람직하게는, 점토는 분쇄 분말, 분무-건조된 비드 또는 미분된 입자의 형태이다.

4. 차단제

하나 이상의 차단제를 사용하여 접착제 조성물 두 파트를 혼합하고 경화를 개시하는 사이에 유도기간을 제공한다. 차단제의 첨가는 접착제 성분의 혼합 직후 경화 속도의 감소를 일으키는 유도 기간을 제공한다. 경화 속도의 감소는 혼합 직후, 차단제를 함유하지 않은 조성물에서 밝혀진 것보다 낮은 초기 인장 전단 강도 및 저장 계수를 유도한다. 유도 기간 후, 접착제는 인장 전단 강도 및 저장 계수가 차단제를 함유하지 않는 접착제에 의해 생성된 것과 유사하도록 신속하게 경화한다. 이러한 텍스트로피는 당해 기술 분야의 숙련자에게 익히 공지되어 있고, 하이드록실 함유 화합물, 예를 들어, 디에틸렌 글리콜, 모노 알킬 에테르, 부탄올 옥심, 메틸 에틸 케톤 옥심, 노닐페놀, 페놀 및 크레졸, 아민 함유 화합물, 예를 들어, 카프로락탐, 디이소프로필 아민, 1,2,4-트리아졸 및 3,5-디메틸 피라졸; 및 지방족 함유 화합물, 예를 들어, 디알킬 말로네이트를 포함한다.

5. 안정화제

본 발명의 접착제는 접착제 조성물을 수분으로부터 보호하는 기능을 하여 접착제 제형 중의 이소시아네이트의 전진을 억제하고 조기 가교결합을 예방하는 안정화제를 추가로 포함할 수 있다. 이러한 안정화제에는 디에틸말로네이트 및 알킬페놀 알킬레이트가 포함된다.

6. 텍스트로피

임의로, 접착제 조성물은 텍스트로피를 추가로 포함할 수 있다. 이러한 텍스트로피는 당해 기술 분야의 숙련자에게 익히 공지되어 있고, 알루미늄, 석회석, 활석, 산화아연, 산화황, 탄산칼슘, 펄라이트, 슬레이트 가루, 염(NaCl), 사이클로텍스트린 등을 포함한다. 텍스트로피는 조성물의 접착제에 목적하는 레올로지 특성을 제공하기에 충분한 양으로 첨가될 수 있다.

7. 가소제

본 발명의 접착제 조성물은 레올로지 특성을 목적하는 조도로 변형시키기 위해 가소제를 추가로 포함할 수 있다. 이러한 물질은 물을 함유하지 않아야 하고, 이소시아네이트 그룹에 대해 불활성이어야 하고, 중합체와 상용성이어야 한다. 적합한 가소제는 당해 기술 분야에 익히 공지되어 있고, 바람직한 가소제는 알킬 프탈레이트, 예를 들어, 디옥틸프탈레이트 또는 디부틸프탈레이트, "HB-40"로 시판되는 부분 수소화된 테르펜, 트리옥틸 포스페이트, 에폭시 가소제, 톨루엔-설파미드, 클로로파라핀, 아디프산 에스테르, 피마자유, 톨루엔 및 알킬 나프탈렌을 포함한다. 접착제 조성물 중의 가소제의 양은 목적하는 레올로지 특성을 제공하고/하거나 시스템에 존재할 수 있는 임의의 촉매를 분산시키기에 충분한 양이다.

8. 상용화제

특정 구현예에서, 본 발명의 혼합물은 하나 이상의 적합한 상용화제를 포함한다. 상용화제는 둘 이상의 비혼화성 성분이 함께 모여 균질한 액체 상을 제공하도록 하는 분자이다. 다수의 이러한 분자들은 폴리우레탄 산업에 공지되어 있고, 이들은 아마이드, 아민, 탄화수소 오일, 프탈레이트, 폴리부틸렌글리콜 및 우레아를 포함한다.

9. 착색제

특정 구현예에서, 본 발명의 혼합물은 하나 이상의 적합한 착색제를 포함한다. 통상적인 무기 착색제는 이산화티탄, 산화철 및 산화크롬을 포함한다. 유기 안료는 아조/디아조 염료, 프탈로시아닌 및 디옥사진 뿐만 아니라 카본 블랙으로부터 유래된다. 폴리올 결합된 착색제의 개발에서 최근 진보는 다음 문헌에 기술되어 있다:

Miley, J. W.; Moore, P. D. "Reactive Polymeric Colorants For Polyurethane", Proceedings Of The SPI-26th Annual Technical Conference; Technomic: Lancaster, Pa., 1981; 83-86.

Moore, P. D.; Miley, J. W.; Bates, S. H.; "New Uses For Highly Miscible Liquid Polymeric Colorants In The Manufacture of Colored Urethane Systems"; Proceedings of the SPI-27th Annual Technical/Marketing Conference; Technomic: Lancaster, Pa., 1982; 255-261.

Bates, S. H.; Miley, J. W. "Polyol-Bound Colorants Solve Polyurethane Color Problems"; Proceedings Of The SPI-30th Annual Technical/ Marketing Conference; Technomic: Lancaster, Pa., 1986; 160-165

Vielee, R. C.; Haney, T. V. "Polyurethanes"; In Coloring of Plastics; Webber, T. G., Ed., Wiley-Interscience: New York, 1979, 191-204.

10. UV 안정화제

특정 구현예에서, 본 발명의 혼합물은 하나 이상의 적합한 UV 안정화제를 포함한다. 방향족 이소시아네이트를 기초로 하는 폴리우레탄은 통상적으로 빛에 노출에 의한 노화시 진한 황색 색조를 바꾼다. 폴리우레탄 풍화 현상의 검토는 다음 문헌에 제시되어 있다: Davis, A.; Sims, D. Weathering Of Polymers; Applied Science: London, 1983, 222-237. 광 보호제, 예를 들어, 하이드록시벤조트리아졸, 아연 디부틸 티오카바메이트, 2,6-디3급 부틸카테콜, 하이드록시벤조페논, 장애 아민 및 포스파이트를 사용하여 폴리우레탄의 광 안정성을 향상시켰다. 착색 안료가 또한 성공적으로 사용되었다.

11. 난연제

특정 구현예에서, 본 발명의 혼합물은 하나 이상의 적합한 난연제를 포함한다. 난연제는 흔히 가연성을 감소시키기 위해 첨가된다. 임의의 특정 폴리우레탄 접착제를 위한 난연제의 선택은 흔히 그 접착제의 의도된 서비스 용도 및 그 용도를 관리하는 부수적인 가연성 시험 시나리오에 좌우된다. 첨가제에 의해 영향받을 수 있는 가연성의 국면은 초기 가연성, 연소율 및 발연성을 포함한다.

가장 널리 사용된 난연제는 염소화 포스페이트 에스테르, 염소화 파라핀 및 멜라민 분말이다. 이들 및 다수의 기타 조성물은 특수 화학 공급자로부터 이용가능하다. 이 주제의 검토는 다음 문헌에 제시되어 있다: Kuryla, W. C.; Papa, A. J. Flame Retardancy of Polymeric Materials, Vol. 3; Marcel Dekker: New York, 1975, 1-133.

V. 폴리우레탄 접착제 조성물

또 하나의 국면에서, 본 발명은 상기 및 본원에서 기재된 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올로부터 유도된 폴리우레탄 접착제를 포함한다. 특정 구현예에서, 폴리우레탄 접착제 조성물은 하나 이상의 이소시아네이트 및 상기 정의된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 조성

물을 함유하는 혼합물의 반응 생성물을 포함한다.

A. 반응성 1-성분 폴리우레탄 접착제

하나의 국면에서, 본 발명은 반응성 1-성분 접착제를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 1-성분 접착제 조성물은 상기 및 본원에서 구현예 및 실시예에서 정의된 바와 같은 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 조성물을 함유하는 혼합물로부터 유도된다.

특정 구현예에서, 1-성분 접착제는 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올로 제조된 프리폴리머이고; 이러한 프리폴리머는 통상적으로 낮은 이소시아네이트 값을 갖고, 과량의 이소시아네이트를 비교적 고분자량 폴리올과 반응시킴으로써 생성된다. 이러한 접착제는 통상적으로 첨가될 수 있거나 대기 또는 결합될 물질에 존재하는 물로 경화된다.

특정 구현예에서, MDI는 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 및 임의로 상기 기술된 하나 이상의 기타 폴리올과 반응하는 바람직한 이소시아네이트이다. 독특한 접착제 성능 특성을 필요로 하는 특정 구현예에서, TDI 및/또는 지방족 이소시아네이트가 MDI 대신 또는 MDI 이외에 사용된다.

특정 구현예에서, 1 성분 접착제는 100% 고체를 포함한다(예: 어떤 용매도 적용시에 존재하지 않는다). 특정 구현예에서, 1 성분 접착제 제형을 용매 또는 물에 용해시키고, 분산시키고/시키거나 유화시켜 점도를 감소시키거나, 그렇지 않으면 이들 적용에서 1 성분 접착제의 적용가능성을 향상시킬 수 있다.

특정 구현예에서, 어떤 촉매도 사용되지 않는다. 특정 구현예에서, 촉매는 유리 이소시아네이트와 물의 반응 속도를 증가시키기 위해 제형에 포함된다.

특정 구현예에서, 하이드록시에틸 아크릴레이트 그룹은 자외선 경화 특성을 도입하기 위해 지방족 폴리카보네이트 폴리올, 기타 폴리올 및/또는 유도체 프리폴리머에 포함시킬 수 있다.

특정 구현예에서, 지방산 그룹 및/또는 불포화 작용성을 갖는 기타 분자를 산화를 통해 가교결합을 가능하게 하기 위해 지방족 폴리카보네이트 폴리올, 기타 폴리올 및/또는 유도체 프리폴리머에 포함시킬 수 있다.

특정 구현예에서, 1-성분 접착제 혼합물은 다음 조성을 갖는 최종 경화된 폴리우레탄 접착제를 형성한다:

1 내지 80중량부의 하나 이상의 이소시아네이트 성분 또는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 이소시아네이트 성분을 기초로 하는 프리폴리머;

20 내지 99중량부의 폴리올 성분 또는 폴리올계 프리폴리머 성분, 여기서 폴리올 성분은 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 약 5중량% 내지 100중량% 포함하고;

상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 하나 이상의 촉매 0 내지 1중량부;

0 내지 20중량부의 하나 이상의 채 연장제, 여기서 채 연장제는 실질적으로 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같고;

0 내지 10중량부의 하나 이상의 첨가제, 여기서 첨가제는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 충전제, 점도, 차단제, 안정화제, 텍스트로피 물질, 가소제, 상용화제, 착색제, UV 안정화제 또는 난연제로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

B. 반응성 2-성분 폴리우레탄 접착제

또 하나의 국면에서, 본 발명은 반응성 2-성분 접착제 조성물을 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 2-성분 접착제 조성물은 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 정의된 바와 같은 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 함유하는 혼합물로부터 유도된다.

특정 구현예에서, 2-성분 접착제는 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올로부터 유도된 프리폴리머를 포함한다. 이러한 프리폴리머는 과량의 이소시아네이트 및/또는 과량의 하이드록실 함량으로 생성한 다음, 하나 이상의 이소시아네이트, 지방족 폴리카보네이트 폴리올, 기타 폴리올 및 상기 기술된 기타 성분과 혼합시킬 수 있다.

특정 구현예에서, 2-성분 접착제는 이소시아네이트 지수 범위 90 내지 150로 배합된다. 특정 구현예에서, 100 이상의 이소시아네이트 지수를 사용하여 접착제의 경도를 증가시키고, 기관, 특히 이들의 표면에 하이드록실 그룹을 갖는 기관에 대한 결합을 향상시킨다 특정 구현예에서, 100 이하의 이소시아네이트 지수를 사용하여 보다

연질이고 보다 가요성인 접착제를 생성한다.

특정 구현예에서, MDI는 2-성분 접착제의 제형에 사용되는 바람직한 이소시아네이트이다. 특정 구현예에서, TDI는 2-성분 접착제의 제형에 사용되는 바람직한 이소시아네이트이다. 특정 구현예에서, 이러한 이소시아네이트는 2보다 큰 작용성을 갖고, 중합체성일 수 있다. 특정 구현예에서, 내자외선성이 필요 조건인 경우 지방족 이소시아네이트를 포함하는 기타 이소시아네이트가 사용된다.

특정 구현예에서, 단지 단일 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 2-성분 접착제의 제형에 사용된다. 특정 구현예에서, 하나 이상의 폴리카보네이트 폴리올을 상기 기술된 바와 같은 하나 이상의 추가의 폴리올과 혼합한다. 특정 구현예에서, 이러한 폴리올은 200 내지 10,000g/mol, 바람직하게는 300 내지 5,000g/mol의 분자량을 갖는다.

특정 구현예에서, 2-성분 접착제는 2.0 이하의 작용성을 갖는 이소시아네이트 및/또는 폴리올과 배합된다. 특정 구현예에서, 접착제는 경화된 2-성분 접착제에 가교결합을 도입하기 위해 작용성 2.0 초과(즉, 어느 정도의 분지화)의 이소시아네이트 및/또는 폴리올과 배합된다. 특정 구현예에서, 총 가교결합 수준은 고탄성률, 고경도 및 우수한 인장, 전단 강도 및 박리 강도 특성을 갖는 접착제를 생성하기에 비교적 높다. 특정 구현예에서, 총 가교결합 수준은 보다 큰 탄성을 갖는 접착제를 생성하기에 비교적 낮다.

특정 구현예에서, 2-성분 접착제는 100% 고체로서 적용된다. 특정 구현예에서, 2 성분 접착제는 용매 또는 물에 용해시키고, 분산시키고/시키거나 유화시켜 점도를 감소시키거나, 그렇지 않으면 이들의 적용가능성을 향상시킬 수 있다. 특정 구현예에서, 용매, 예를 들어, 아세톤, 메틸 에틸 케톤, 에틸아세테이트, 톨루엔 또는 크실렌이 바람직하다.

특정 구현예에서, 어떤 충전제도 2-성분 접착제에 존재하지 않는다. 기타 구현예에서, 탄산칼슘, 활석, 점토 등은 레올로지를 조절하고, 수축을 감소시키고, 비용을 감소시키고/시키거나 기타 이유로 충전제로서 첨가된다. 특정 구현예에서, 2-성분 접착제는 필요한 가공 및 완성된 접착제 특성을 달성하기 위해 텍스트로피제, 유동제, 필름-형성 첨가제 및/또는 촉매를 포함한다.

특정 구현예에서, 2-성분 접착제 혼합물은 다음 조성을 갖는 최종 경화된 폴리우레탄 접착제를 형성한다:

10 내지 40중량부의 하나 이상의 이소시아네이트 성분 또는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 이소시아네이트 성분을 기초로 하는 프리폴리머;

60 내지 90중량부의 폴리올 성분 또는 폴리올계 프리폴리머 성분, 여기서 폴리올 성분은 상기 및 본원에 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 약 5중량% 내지 100중량% 포함하고;

상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 하나 이상의 촉매 0 내지 1중량부;

0 내지 20중량부의 하나 이상의 쇠 연장제, 여기서 쇠 연장제는 실질적으로 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같고;

0 내지 10중량부의 하나 이상의 첨가제, 여기서 첨가제는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 충전제, 점토, 차단제, 안정화제, 텍스트로피 물질, 가소제, 상용화제, 착색제, UV 안정화제 또는 난연제로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

특정 구현예에서, 본 발명은 상기 기술된 바와 같은 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 및 하나 이상의 시판되는 폴리에스테르 또는 폴리에테르 폴리올을 포함하는 폴리올 블렌드로부터 배합된 접착제를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 블렌드의 지방족 폴리카보네이트 함량은 약 10 내지 약 90%이다. 이러한 블렌드는 도 8에 도시된 바와 같은 경도 또는 탄성 범위를 제공하도록 배합할 수 있다. 특정 구현예에서, 본 발명은 폴리에스테르 폴리올을 포함하는 균형을 갖춘 약 10%, 약 20%, 약 30%, 약 40%, 약 50%, 약 60%, 약 70%, 또는 약 80% 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 포함하는 폴리올 블렌드로부터 유도된 접착제 조성물을 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 블렌드는 폴리에스테르 폴리올로서 폴리(부틸렌 아디페이트) 글리콜을 포함한다. 특정 구현예에서, 본 발명은 폴리에테르 폴리올을 포함하는 균형을 갖춘 약 10%, 약 20%, 약 30%, 약 40%, 약 50%, 약 60%, 약 70%, 또는 약 80% 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 포함하는 폴리올 블렌드로부터 유도된 접착제 조성물을 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 블렌드는 폴리에테르 폴리올 성분으로서 폴리에틸렌 글리콜 또는 폴리프로필렌 글리콜을 포함한다.

C. 핫-멜트 폴리우레탄 접착제

하나의 국면에서, 본 발명은 반응성 핫 멜트 접착제를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 반응성 핫 멜트 접착

제 조성물은 상기 및 본원에서 구현예 및 실시예에서 정의된 바와 같은 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 조성물을 함유하는 혼합물로부터 유도된다.

특정 구현예에서, 핫-멜트 접착제는 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올로부터 유도된 프리폴리머를 포함한다. 이러한 프리폴리머는 과량의 이소시아네이트 및/또는 과량의 하이드록실 함량으로 생성한 다음, 하나 이상의 이소시아네이트, 지방족 폴리카보네이트 폴리올, 기타 폴리올 및 상기 기술된 기타 성분과 혼합시킬 수 있다. 특정 구현예에서, 이소시아네이트 대 폴리올의 몰 비는 1.5:1 내지 4:1, 바람직하게는 1.9:1 내지 3:1, 종종 아주 가까이 2:1이다.

특정 구현예에서, MDI는 하나 이상의 지방족 폴리올, 가능하게는 상기 기술된 하나 이상의 기타 폴리올과 반응하는 바람직한 이소시아네이트이다. 독특한 핫 멜트 접착제 성능 특성을 필요로 하는 특정 구현예에서, TDI 및/또는 지방족 이소시아네이트가 MDI 대신 또는 MDI 이외에 사용된다.

특정 구현예에서, 반응성 핫 멜트 접착제 프리폴리머는 과량의 이소시아네이트를 비교적 고분자량 폴리올과 반응시킴으로써 생성된다. 이러한 프리폴리머는 따라서 대기 수분과 반응하여 완성된 반응성 핫 멜트 접착제의 특성을 향상시키는 과량의 이소시아네이트 또는 "유리" 이소시아네이트 그룹을 갖는다. 특정 구현예에서, 유리 이소시아네이트의 양은 약 1 내지 5중량%이다.

특정 구현예에서, 폴리올, 이소시아네이트 및/또는 반응성 핫 멜트 접착제의 1차 성분을 포함하는 프리폴리머를 접착제 제형의 점도가 기관에 대한 효율적인 적용을 가능하게 하는 적용 온도에서 충분히 낮도록 배합된다. 반응성 핫 멜트 점도는 냉각되어 신속하게 우수한 접착성을 제공할 때 증가한다.

특정 구현예에서, 반응성 핫 멜트 폴리우레탄 접착제 혼합물은 다음 조성을 갖는 최종 경화된 폴리우레탄 접착제를 형성한다:

5 내지 40중량부의 하나 이상의 이소시아네이트 성분 또는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 이소시아네이트 성분을 기초로 하는 프리폴리머;

60 내지 95중량부의 폴리올 성분 또는 폴리올계 프리폴리머 성분, 여기서 폴리올 성분은 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 약 5중량% 내지 100중량% 포함하고;

상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 하나 이상의 촉매 0 내지 1중량부;

0 내지 20중량부의 하나 이상의 쇄 연장제, 여기서 쇄 연장제는 실질적으로 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같고;

0 내지 10중량부의 하나 이상의 첨가제, 여기서 첨가제는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 충전제, 점토, 차단제, 안정화제, 텍소트로피 물질, 가소제, 상용화제, 착색제, UV 안정화제 또는 난연제로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

D. 비반응성 용매계 폴리우레탄 접착제

또 하나의 국면에서, 본 발명은 비반응성 용매계 접착제를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 용매계 접착제 조성물은 상기 및 본원에서 구현예 및 실시예에서 정의된 바와 같은 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 조성물로부터 유도된다.

특정 구현예에서, 용매계 접착제는 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올과 하나 이상의 이소시아네이트, 가능하게는 고분자량 프리폴리머 및/또는 폴리우레탄 접착제를 생성하기 위해 상기 기술된 하나 이상의 추가의 폴리올 및/또는 모든 기타 첨가제와 반응시킴으로써 생성된다. 이어서, 이러한 고분자량 폴리우레탄을 각종 기관 위에 적용하기 위한 하나 이상의 용매에 용해시킨다. 이러한 구현예에서, 용매계 접착제는 1-성분 시스템으로서 기술된다. 추가의 충전제 및 성능 개선 첨가제가 제형에 포함될 수 있다.

특정 구현예에서, 용매계 가교결합제를 완성된 접착제의 강도 및 내성을 향상시키기 위해 상기한 용매계 폴리우레탄 접착제에 첨가한다. 가교결합제는 상기한 지방족 폴리카보네이트 폴리올, 추가의 폴리올 및 이소시아네이트의 임의의 조합일 수 있고, 또한 기타 형태의 열경화성 성분일 수 있다. 이러한 구현예에서, 용매계 접착제는 2-성분 반응성 시스템으로서 기술되고, 따라서 이러한 시스템이 하나 이상의 용매에 용해되는 구현예에서 상기 기술된 2-성분 반응성 접착제와 유사하고/하거나 등가이다.

특정 구현예에서, 비반응성 용매계 접착제 혼합물은 다음 조성을 갖는 최종 경화된 폴리우레탄 접착제를 형성한

다:

5 내지 30중량부의 하나 이상의 이소시아네이트 성분 또는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 이소시아네이트 성분을 기초로 하는 프리폴리머;

70 내지 95중량부의 폴리올 성분 또는 폴리올계 프리폴리머 성분, 여기서 폴리올 성분은 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 약 5중량% 내지 100중량% 포함하고;

상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 하나 이상의 촉매 0 내지 1중량부;

0 내지 20중량부의 하나 이상의 쇠 연장제, 여기서 쇠 연장제는 실질적으로 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같고;

0 내지 10중량부의 하나 이상의 첨가제, 여기서 첨가제는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 충전제, 점토, 차단제, 안정화제, 텍소트로피 물질, 가소제, 상용화제, 착색제, UV 안정화제 또는 난연제로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

E. 비반응성 수성 접착제

하나의 국면에서, 본 발명은 반응성 수성 접착제를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 수성 접착제 조성물은 상기 및 본원에서 구현예 및 실시예에서 정의된 바와 같은 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 조성물을 함유하는 혼합물로부터 유도된다.

특정 구현예에서, 수성 접착제는 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 하나 이상의 이소시아네이트, 가능하계는 고분자량 프리폴리머 및/또는 폴리우레탄 접착제를 생성하기 위한 상기 기술된 하나 이상의 추가의 폴리올 및/또는 모든 기타 첨가제와 반응시켜 생성한 다음, 물에 분산시키고, 폴리우레탄 분산액(PUD)으로서 공지된다. 특정 구현예에서, 그들은 중합체를 물에서 안정화시키는 것을 돕기 위해 저수준의 용매를 함유할 수 있다.

특정 구현예에서, 최종 PUD 접착제의 고체 함량은 25 내지 75%의 범위, 바람직하게는 35 내지 50%의 범위 내이다. 특정 구현예에서, 수성 접착제는 점도 필요 요건, 기타 처리 고려사항 및 필요한 완성된 접착제 특성에 따라 이러한 범위의 매우 높거나 낮은 말단 위에 존재하도록 배합된다.

특정 구현예에서, 수성 가교결합제를 완성된 접착제 성능을 향상시키기 위해 상기 기술된 수성 PUD에 첨가한다. 가교결합제는 상기한 지방족 폴리카보네이트 폴리올, 추가의 폴리올 및 이소시아네이트의 임의의 조합일 수 있고, 또한 기타 형태의 열경화성 성분일 수 있다. 이러한 구현예에서, 수성 접착제는 이들 시스템이 물에 분산되거나 유화되는 구현예에서 상기한 2-성분 반응성 시스템과 유사하다(그것이 수성 시스템에 분산되는 경우 제외).

특정 구현예에서, 비반응성 수성 접착제 혼합물은 다음 조성을 갖는 최종 경화된 폴리우레탄 접착제를 형성한다:

20 내지 50중량부의 하나 이상의 이소시아네이트 성분 또는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 이소시아네이트 성분을 기초로 하는 프리폴리머;

50 내지 80중량부의 폴리올 성분 또는 폴리올계 프리폴리머 성분, 여기서 폴리올 성분은 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 약 5중량% 내지 100중량% 포함하고;

상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 하나 이상의 촉매 0 내지 1중량부;

0 내지 20중량부의 하나 이상의 쇠 연장제, 여기서 쇠 연장제는 실질적으로 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같고;

0 내지 10중량부의 하나 이상의 첨가제, 여기서 첨가제는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 충전제, 점토, 차단제, 안정화제, 텍소트로피 물질, 가소제, 상용화제, 착색제, UV 안정화제 또는 난연제로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

F. 비반응성 핫 멜트 접착제

하나의 국면에서, 본 발명은 비반응성 핫 멜트 접착제를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 비반응성 핫 멜트 접착제 조성물은 상기 및 본원에서 구현예 및 실시예에서 정의된 바와 같은 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 조성물을 함유하는 혼합물로부터 유도된다.

특정 구현예에서, 비반응성 핫 멜트 접착제는 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올과 하나 이상의 이소시아네이트, 가능하게는 고분자량 중합체 및/또는 폴리우레탄 접착제를 생성하기 위한 상기 기술된 하나 이상의 추가의 폴리올 및/또는 모든 기타 첨가제와 반응시킴으로써 생성된다. 추가의 충전제 및 성능 개선 첨가제가 제형에 포함될 수 있다.

특정 구현예에서, 폴리올, 이소시아네이트, 비반응성 핫 멜트 접착제의 1차 성분을 포함하는 프리폴리머 및/또는 폴리우레탄 접착제를 접착제 제형의 점도가 기판에 대한 효율적인 적용을 가능하게 하는 적용 온도에서 충분히 낮도록 배합한다. 비반응성 핫 멜트 점도는 냉각되어 신속하게 우수한 접착성을 제공할 때 증가한다. 특정 적용에서, 그들은 용융 점도 25,000 내지 500,000 mPa^{*}s, 더욱 바람직하게는 50,000 내지 250,000 mPa^{*}s를 갖도록 배합된다.

특정 구현예에서, 비반응성 핫-멜트 접착제 혼합물은 다음 조성을 갖는 최종 경화된 폴리우레탄 접착제를 형성한다:

1 내지 80중량부의 하나 이상의 이소시아네이트 성분 또는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 이소시아네이트 성분을 기초로 하는 프리폴리머;

20 내지 99중량부의 폴리올 성분 또는 폴리올계 프리폴리머 성분, 여기서 폴리올 성분은 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 약 5중량% 내지 100중량% 포함하고;

상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 하나 이상의 촉매 0 내지 1중량부;

0 내지 20중량부의 하나 이상의 쇠 연장제, 여기서 쇠 연장제는 실질적으로 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같고;

0 내지 10중량부의 하나 이상의 첨가제, 여기서 첨가제는 상기 및 본원에서 특정 구현예 및 실시예에서 기술된 바와 같은 충전제, 점토, 차단제, 안정화제, 텍소트로피 물질, 가소제, 상용화제, 착색제, UV 안정화제 또는 난연제로 이루어진 그룹으로부터 선택된다.

G. 하이브리드 시스템

특정 구현예에서, 임의의 상기 반응성 및 비반응성 접착제 제형은 하이브리드 시스템에서 다른접착제 화학과 배합된다. 특정 구현예에서, 완성된 접착제는 PUD 및 아크릴 에멀전 중합체와 함께 수분산성 이소시아네이트를 사용하고 공중합된 수지 등을 생성하기 위해 아크릴 및 하이드록실 폴리올을 혼합하는 수성 시스템을 포함하는, 다수의 형태를 취할 수 있는 우레탄 아크릴 시스템이다. 특정 구현예에서, 비닐 말단화 아크릴 중합체를 사용하여 내충격성을 개선시킨다. 특정 구현예에서, 아크릴 작용성을 갖는 폴리우레탄을 또한 인성을 증가시키기 위해 험기성 또는방사선 경화된 접착제에 사용한다. 특정 구현예에서, 우레탄은 아민 경화 시스템을 사용하여 에폭시 화학과 배합하여 구조적 및 중질 적용을 위한 신속 경화 접착제를 생성한다.

VI. 개선된 특성을 갖는 접착제

본 발명에 의해 제공된 접착제는 독특하고 기대치 않은 특성을 갖는다. 상기 기술된 바와 같이, 본 발명의 접착제에 도입된 에폭사이드-CO₂계 폴리올은 인접하는 카보네이트 결합 사이에 포획된 2개 이상의 탄소 원자를 갖는 기존의 통상의 폴리카보네이트 폴리올과 상이하다. 이론에 결부되지 않거나 이에 의해 본 발명의 범위를 제한하지 않고, 하나의 가능성은 기존의 폴리카보네이트 폴리올과 비교하여 CO₂-계 폴리올의 단위 쇠 길이당 고밀도의 카보네이트 작용 그룹은, 예를 들어, 접착성, 고온 강도 및 내용매성과 같은 바람직한 특성의 예기치 않은 증가를 유도한다.

A. 개선된 고온 강도

특정 구현예에서, 본 발명은 CO₂ 및 하나 이상의 에폭사이드의 공중합으로부터 유도된 폴리올을 포함하는 접착제를 포함하고, 경화된 접착제가 승온에서 예기치 않게 고강도를 갖는다는 것을 특징으로 한다. 승온에서 고강도는 주위 온도에서 ASTM D1002 랩 전단 시험을 사용하여 금속 기판 상에서 경화된 접착제 강도의 강도를 측정한다. 하나 이상의 승온에서 동일한 측정을 수행함으로써 입증될 수 있다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제(즉, 상기 기술된 임의의 접착제 조성물)는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 강도의 적어도 60%를 유지한다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일

한 절차를 사용하여 측정된 강도의 적어도 65%, 적어도 70%, 적어도 75%, 적어도 80%, 적어도 85%, 적어도 90%, 적어도 92%, 적어도 95%, 또는 적어도 98%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 강도의 50 내지 100%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 강도의 50% 내지 80%, 70% 내지 80%, 60% 내지 80%, 70% 내지 100% 또는 80% 내지 100%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 상기 비교된 강도는 파괴시 하중; 파단 인장 에너지; 항복 응력; 및 항복 변형률로 이루어진 그룹으로부터 선택된 측정치로 나타낸다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제(즉, 상기 기술된 임의의 접착제 조성물)는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 파괴시 하중으로 나타낸 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파괴시 하중의 적어도 60%이라는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 파괴시 하중이 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파괴시 하중의 적어도 65%, 적어도 70%, 적어도 75%, 적어도 80%, 적어도 85%, 적어도 90%, 적어도 92%, 적어도 95%, 또는 적어도 98%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 파괴시 하중이 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파괴시 하중의 50 내지 100%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 파괴시 하중이 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파괴시 하중의 50% 내지 80%, 70% 내지 80%, 60% 내지 80%, 70% 내지 100% 또는 80% 내지 100%임을 특징으로 한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제(즉, 상기 기술된 임의의 접착제 조성물)는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 파단 인장 에너지로 나타낸 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파단 인장 에너지의 적어도 60%이라는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 파단 인장 에너지가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파단 인장 에너지의 적어도 65%, 적어도 70%, 적어도 75%, 적어도 80%, 적어도 85%, 적어도 90%, 적어도 92%, 적어도 95%, 또는 적어도 98%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 파단 인장 에너지가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파단 인장 강도의 50 내지 100%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 파단 인장 에너지가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파단 인장 에너지의 50% 내지 80%, 70% 내지 80%, 60% 내지 80%, 70% 내지 100% 또는 80% 내지 100%임을 특징으로 한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제(즉, 상기 기술된 임의의 접착제 조성물)는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 항복 응력 또는 항복 변형률로 나타낸 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 상응하는 변수의 적어도 60%이라는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 항복 응력 또는 항복 변형률이 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 상응하는 변수의 적어도 65%, 적어도 70%, 적어도 75%, 적어도 80%, 적어도 85%, 적어도 90%, 적어도 92%, 적어도 95%, 또는 적어도 98%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 항복 응력 또는 항복 변형률이 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 상응하는 변수의 50 내지 100%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 항복 응력 또는 항복 변형률이 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 상응하는 변수의 50% 내지 80%, 70% 내지 80%, 60% 내지 80%, 70% 내지 100% 또는 80% 내지 100%임을 특징으로 한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제(즉, 상기 기술된 임의의 접착제 조성물)는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 강도보다 크다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 강도보다 적어도 10% 더 높다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 강도보다 적어도 15%, 적어도 20%, 적어도 30%, 적어도 40%, 적어도 50%, 적어도 75%, 적어도 100%, 또는 적어도 150% 더 크다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 강도의 100% 내지 200%, 100% 내지 150%, 120% 내지 180%, 120% 내지 150%, 또는 100% 내지 120%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 상기 비교된 강도는 파괴시 하중; 파단 인장 에너지; 항복 응력; 및 항복 변형률로 이루어진 그룹으로부터 선택된 측정치로 나타낸다. 특정 구현예에서, 상기 비교된 강도는 파괴시 하중; 파단 인장 에너지; 및 항복 변형률로 이루어진 그룹으로부터 선택된 측정치로 나타낸다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제(즉, 상기 기술된 임의의 접착제 조성물)는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 파괴시 하중으로 나타낸 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 파괴시 하중보다 크다는 것을 특징으로 한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 경화된 접착제의 파괴시 하중이 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파괴시 하중보다 적어도 10% 더 높다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 경화된 접착제의 파괴시 하중이 25℃에서 파괴시 하중보다 적어도 15%, 적어도 20%, 적어도 30%, 적어도 40%, 적어도 50%, 적어도 75%, 적어도 100%, 또는 적어도 150% 더 크다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 파괴시 하중이 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파괴시 하중의 100% 내지 200%, 100% 내지 150%, 120% 내지 180%, 120% 내지 150%, 또는 100% 내지 120%임을 특징으로 한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제(즉, 상기 기술된 임의의 접착제 조성물)는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 파단 인장 에너지로 나타낸 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 파단 인장 에너지보다 크다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 경화된 접착제의 파단 인장 에너지가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 파단 인장 에너지보다 적어도 10% 더 높다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 경화된 접착제의 파단 인장 에너지가 25℃에서 접착제의 파단 인장 에너지보다 적어도 15%, 적어도 20%, 적어도 30%, 적어도 40%, 적어도 50%, 적어도 75%, 적어도 100%, 또는 적어도 150% 더 크다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 파단 인장 에너지가 25℃에서 접착제의 파단 인장 에너지의 100% 내지 200%, 100% 내지 150%, 120% 내지 180%, 120% 내지 150%, 또는 100% 내지 120%임을 특징으로 한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제(즉, 상기 기술된 임의의 접착제 조성물)는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 항복 변형률로 나타낸 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 항복 변형률보다 크다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 경화된 접착제의 항복 변형률이 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 항복 변형률보다 적어도 10% 더 높다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 경화된 접착제의 항복 변형률이 25℃에서 접착제의 항복 변형률보다 적어도 15%, 적어도 20%, 적어도 30%, 적어도 40%, 적어도 50%, 적어도 75%, 적어도 100%, 또는 적어도 150% 더 크다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 항복 변형률이 25℃에서 접착제의 항복 변형률의 100% 내지 200%, 100% 내지 150%, 120% 내지 180%, 120% 내지 150%, 또는 100% 내지 120%임을 특징으로 한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제(즉, 상기 기술된 임의의 접착제 조성물)는 70℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 강도의 적어도 40%를 유지한다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 50℃에서 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 강도의 적어도 55%, 적어도 60%, 적어도 65%, 적어도 70%, 적어도 75% 또는 적어도 80%이라는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 70℃에서 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 강도의 40% 내지 100%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 70℃에서 측정된 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 강도의 40% 내지 80%, 40% 내지 60%, 50% 내지 80%, 50% 내지 70%, 또는 70% 내지 90%임을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 상기 비교된 강도는 파괴시 하중; 파단 인장 에너지; 항복 응력; 및 항복 변형률로 이루어진 그룹으로부터 선택된 측정치로 나타낸다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제(즉, 상기 기술된 임의의 접착제 조성물)는 70℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 항복 변형률로 나타낸 경화된 접착제의 강도가 25℃에서 항복 변형률보다 크다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 70℃에서 ASTM D1002를 사용하여 측정된 경화된 접착제의 항복 변형률이 25℃에서 동일한 절차를 사용하여 측정된 항복 변형률보다 적어도 10% 더 높다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 70℃에서 경화된 접착제의 항복 변형률이 25℃에서 접착제의 항복 변형률보다 적어도 15%, 적어도 20%, 적어도 30%, 적어도 40%, 적어도 50%, 적어도 75%, 적어도 100% 또는 적어도 150% 더 크다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제는 70℃에서 측정된 경화된 접착제의 항복 변형률이 25℃에서 접착제의 항복 변형률의 100% 내지 200%, 100% 내지 150%, 120% 내지 180%, 120% 내지 150%, 또는 100% 내지 120%임을 특징으로 한다.

특정 구현예에서, 본 발명은 경화된 접착제가 ASTM D1002로 측정된 다음 특성을 가짐을 특징으로 하는 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하는 접착제 조성물을 포함한다:

- 25℃에서 파괴시 하중의 75% 내지 200%인 50℃에서 파괴시 하중; 및

- 25℃에서 파단 인장 에너지를 초과하는 50℃에서 파단 인장 에너지.

특정 구현예에서, 본 발명은 경화된 접착제가 ASTM D1002로 측정된 다음 특성을 가짐을 특징으로 하는 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하는 접착제 조성물을 포함한다:

- 25℃에서 항복 응력의 적어도 60%인 50℃에서 항복 응력; 및
- 25℃에서 항복 변형률을 초과하는 50℃에서 항복 변형률.

특정 구현예에서, 본 발명은 경화된 접착제가 ASTM D1002로 측정된 다음 특성을 가짐을 특징으로 하는 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하는 접착제 조성물을 포함한다:

- 25℃에서 파괴시 하중의 75% 내지 200%인 50℃에서 파괴시 하중;
- 25℃에서 파단 인장 에너지를 초과하는 50℃에서 파단 인장 에너지;
- 25℃에서 항복 응력의 적어도 60%인 50℃에서 항복 응력; 및
- 25℃에서 항복 변형률을 초과하는 50℃에서 항복 변형률.

특정 구현예에서, 본 발명은 경화된 접착제가 ASTM D1002로 측정된 다음 특성을 가짐을 특징으로 하는 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하는 접착제 조성물을 포함한다:

- 25℃에서 파괴시 하중을 초과하는 50℃에서 파괴시 하중;
- 25℃에서 판단 인장 에너지를 초과하는 50℃에서 판단 인장 에너지; 및
- 25℃에서 항복 변형률과 같거나 초과하는 70℃에서 항복 변형률.

B. 향상된 투명성

또 하나의 국면에서, 본 발명은 경화된 접착제가 매우 투명성을 특징으로 하는 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하는 접착제 조성물을 포함한다. 이러한 투명성은 시판되는 폴리카보네이트 폴리올(예: 인접한 카보네이트 결합 사이에 포획된 2개 이상의 탄소 원자를 갖는 것들)과 배합된 유사한 접착제가 경화될 때 흐리기 때문에, 예기치 않은 것이다(참조: 예를 들어, 도 7).

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제 조성물은 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하고, 추가로 그들이 ASTM D1003-00으로 측정된 85% 초과와 총 광 투과율을 갖는다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제 조성물은 추가로 그들이 ASTM D1003으로 측정된 90% 초과, 95% 초과, 96% 초과, 97% 초과, 98% 초과 또는 99% 초과와 광 투과율을 가짐을 특징으로 한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제 조성물은 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하고, 추가로 그들이 ASTM D1003을 사용하여 측정된 85% 초과와 총 광 투과율(반사에 대해 보정됨)을 가짐을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제 조성물은 추가로 그들이 ASTM D1003으로 측정된 90% 초과, 95% 초과, 96% 초과, 97% 초과, 98% 초과 또는 99% 초과와 광 투과율을 가짐을 특징으로 한다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제 조성물은 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하고, 추가로 그들이 ASTM D1003-92를 사용하여 측정된 20% 미만의 헤이즈 값을 가짐을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제 조성물은 추가로 그들이 ASTM D1003-92를 사용하여 측정된 15% 미만, 10% 미만, 7% 미만, 6% 미만, 5% 미만, 또는 3% 미만의 헤이즈 값을 가짐을 특징으로 한다.

C. 향상된 내용매성

또 하나의 국면에서, 본 발명은 경화된 접착제가 매우 내용매성임을 특징으로 하는 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하는 접착제 조성물을 포함한다. 이러한 내용매성은, 시판되는 폴리카보네이트 폴리올(인접한 카보네이트 결합 사이에 포획된 2개이상의 탄소 원자를 갖는 것들)과 배합된 유사한 접착제가 용매에 의해 본 발명의 접착제보다 큰 정도로 열화되기 때문에, 예기치 않은 것이다. (참조: 예를 들어, 도 5).

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제 조성물은 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하고, 추가로 그들이 탄화수소 용매에 대한 우수한 내성을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명의 접착제 조성물은 그들이 방향족

탄화수소에 대한 뛰어난 내성을 가짐을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 본 발명은 방향족 탄화수소 액체에 1주일 동안 침지시킬 때 그들이 5% 미만의 질량이 증가함을 특징으로 하는 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함한다. 특정 구현예에서, 그들은 톨루엔에 1주일 동안 침지시킬 때 5% 미만의 질량이 증가한다. 특정 구현예에서, 그들은 크실렌에 1주일 동안 침지시킬 때 1% 미만의 질량이 증가한다.

D. 저인장 세트 가요성 접착제

또 하나의 측면에서, 본 발명은 경화된 접착제가 연신 후 매우 저인장 세트를 가짐을 특징으로 하는 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하는 접착제 조성물을 포함한다. 이러한 저인장 세트 특성은, 시판되는 폴리카보네이트(인접한 카보네이트 결합사이에 포획된 2개 이상의 탄소 원자를 갖는 것들)과 배합된 유사한 접착제가 이러한 저인장 세트를 입증하지 않기 때문에, 예기치 않은 것이다.

특정 구현예에서, 본 발명의 접착제 조성물은 에폭사이드-CO₂-계 폴리올을 포함하고, 추가로 그들이 적어도 500%로 연신된 후 2% 미만의 인장 세트를 가짐을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 인장 세트는 500%로 연신된 후 1% 미만 또는 0.5% 미만이다. 특정 구현예에서, 인장 세트는 1000%로 연신된 후 2% 미만, 1% 미만 또는 0.5% 미만이다.

VII. 폴리올의 블렌드를 기초로 하는 접착제

접착제의 특성에서 상기 개선은 특정 적용에서 매우 바람직하다. 그럼에도 불구하고, 단독으로 에폭사이드-CO₂-유도된 폴리올을 기초로 하는 접착제의 특성은 모든 적용에 적합하지는 않다. 예를 들어, PPC-계 접착제의 강도는 매우 높지만, 접착제는 특별히 가요성이지는 않다. 결합된 부분이 구부러지거나 서로에 대해 이동해야 하는 것들과 같은 특정 접착제 적용에서, 이는 바람직하지 않을 수 있다. 다행히도, 본 발명자들은 또한 신규한 접착제가 에폭사이드-CO₂ 폴리올과 전통적인 폴리우레탄 폴리올, 예를 들어, 폴리에스테르 폴리올 및 폴리에테르 폴리올의 혼합물을 기초로 하여 배합될 수 있다는 것을 밝혀내었다. 블렌드를 사용하여, 매우 높은 인장 강도로부터 비가요성 접착제를 통해 매우 연질이고 가요성인 접착제까지의 연속체를 갖는 접착제를 배합하는 것이 가능하다. 예기치 않게, 심지어 매우 가요성 접착제로 배합될 경우에서, 에폭사이드 CO₂ 폴리올의 도입은 놀라운 인성을 부여한다.

특정 구현예에서, 본 발명은 폴리에테르 또는 폴리에스테르 폴리올과 함께, 상기 기술된 CO₂-에폭사이드-유도된 폴리카보네이트 폴리올로부터 배합된 접착제를 포함한다. 특정 구현예에서, 폴리에테르 또는 폴리에스테르 폴리올은 접착제 제형에 존재하는 폴리올의 약 5 내지 약 50% 포함한다. 이 범위로 폴리에테르 또는 폴리에스테르 폴리올의 도입은 에폭사이드 CO₂ 폴리올만을 기초로 하는 것들보다 더욱 가요성인 접착제를 제공한다.

특정 구현예에서, 본 발명은 상기 및 본원에서 부류, 아부류 및 실시예에서 기술된 하나 이상의 지방족 폴리카보네이트 폴리올과 하나 이상의 폴리에스테르 폴리올의 혼합물을 포함하는 접착제를 포함한다. 특정 구현예에서, 이러한 접착제의 폴리올 성분은 임의의 화학식 **P2a** 내지 **P2r-a**의 지방족 폴리카보네이트 폴리올 (또는 이들 중 둘 이상의 혼합물)을 포함하는 균형으로 폴리에스테르 폴리올을 5% 내지 약 10%, 10% 내지 약 25% 또는 20% 내지 약 50% 포함한다. 특정 구현예에서, 폴리에스테르 폴리올은 디올 및 이산을 기초로 하는 물질(예: 아디프산(AA); 세박산(SBA); 석신산(SA); 도데칸디오산(DDA); 이소프탈산(iPA); 아젤라산(Az); 에틸렌 글리콜(EG); 프로필렌 글리콜(PG); 1,3 프로판 디올; 1,4-부탄디올(BDO); 1,6-헥산디올(HID); 디에틸렌 글리콜(DEG); 네오펜틸 글리콜(NPG); 3-메틸-1,5-펜탄디올(MPD)을 기초로 하는 중합체를 포함한다. 이들의 예는 다음을 포함하지만, 이에 국한되지 않는다:

분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 AA-EG 폴리에스테르;

분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 AA-EG/BDO 폴리에스테르;

분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 AA-PG 폴리에스테르

분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 AA-BDO 폴리에스테르;

분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 AA-BDO/HID 폴리에스테르;

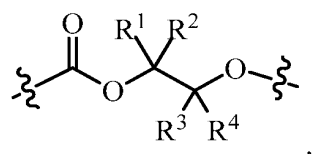
분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 AA-DEG 폴리에스테르;

분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 AA-NPG 폴리에스테르;
 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 AA-NPG/HID 폴리에스테르;
 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 AA-HID 폴리에스테르;
 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 AA-MPD 폴리에스테르;
 분자량 2,000, 3,000, 4,000 또는 5,000g/mol의 SEA-HID 폴리에스테르;
 분자량 2,000, 3,000, 4,000 또는 5,000g/mol의 DDA-HID 폴리에스테르;
 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 Az-EG 폴리에스테르;
 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 Az/iPA-EG/NPG 폴리에스테르;
 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 SA-EG 폴리에스테르;
 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 SA-DEG 폴리에스테르;
 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 SA-NPG 폴리에스테르;
 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 SA-PG 폴리에스테르;

특정 구현예에서, 폴리에스테르 폴리올은 카프로락톤 또는 프로피오락톤의 개환 중합에 의해 형성된다. 예를 들어, 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 폴리카프로락톤; 또는 분자량 500, 1,000, 2,000 또는 3,000g/mol의 폴리프로피오락톤.

특정 구현예에서, 본 발명은 폴리이소시아네이트와 폴리올 조성물의 반응으로부터 유도된 폴리우레탄 접착제를 포함하고, 여기서 폴리올 조성물은 폴리(프로필렌 카보네이트); 폴리(에틸렌 카보네이트); 및 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트)로 이루어진 그룹으로부터 선택된 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 50 내지 95중량% 및 5 내지 50중량%의 폴리에스테르 폴리올을 함유함을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 폴리우레탄 접착제는 추가로 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 약 500g/mol 내지 10,000g/mol; 또는 약 500 내지 5,000g/mol; 또는 약 500 내지 3,000g/mol, 또는 약 500 내지 1,500g/mol, 또는 약 1,000 내지 2,500g/mol, 또는 약 3,000 내지 7,000g/mol의 Mn을 가짐을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 폴리우레탄 접착제는 추가로 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 작용성 수 2를 갖거나, 지방족 폴리카보네이트 폴리올이 2 초과와 작용성 수를 가짐을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 폴리우레탄 접착제는 추가로 함유하는 폴리에스테르가 아디프산(AA); 세박산(SBA); 석신산(SA); 도데칸디오산(DDA); 이소프탈산(iPA); 아젤라산(Az); 에틸렌 글리콜(EG); 프로필렌 글리콜(PG); 1,3 프로판 디올; 1,4-부탄디올(BDO); 1,6-헥산디올(HID); 디에틸렌 글리콜(DEG); 네오펜틸 글리콜(NPG); 및 3-메틸-1,5-펜탄디올(MPD) 중의 하나 이상으로부터 유도된다는 것을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 이러한 접착제 제형은 추가로 그들이 5% 초과와 항복 변형률(즉, ASTM D1002를 사용하여 측정됨)을 가짐을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 접착제 제형은 추가로 그들이 10% 초과와 항복 변형률을 가짐을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 이러한 접착제 제형은 추가로 그들이 100% 초과와 판단신도(즉, ASTM D412를 사용하여 측정됨)를 가짐을 특징으로 한다. 특정 구현예에서, 접착제 제형은 추가로 그들이 200% 초과, 300% 초과 또는 500% 초과와 판단신도를 가짐을 특징으로 한다.

또 하나의 국면에서, 본 발명은 상기 기술된 지방족 폴리카보네이트 폴리올과 기타 통상적으로 사용되는 폴리올의 혼합물을 포함하는 접착제 조성물 및 제형을 제공한다. 특정 구현예에서, 본 발명은 폴리우레탄 접착제를 위한 강도 증강 첨가제를 포함하고, 여기서 첨가제는 CO₂와 하나 이상의 에폭사이드의 공중합으로부터 유도된 폴리카보네이트 폴리올을 포함한다. 특정 구현예에서, 첨가제는 다음 구조를 갖는 1차 반복 단위를 갖는다:



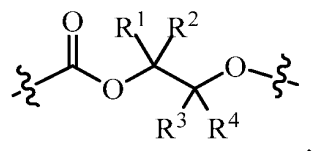
여기서, R¹, R², R³ 및 R⁴는 각각 상기 및 본원에서 부류 및 아부류에서 정의된 바와 같다.

특정 구현예에서, 첨가제는 접착제 제형에 존재하는 폴리올의 약 1% 내지 약 40% 포함한다. 특정 구현예에서,

첨가제는 이산화탄소 및 하나 이상의 에폭사이드의 공중합으로부터 유도된 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 갖는 접착제 제형에 존재하는 폴리올의 2% 내지 5% 포함한다. 특정 구현예에서, 첨가제는 존재하는 폴리올의 1% 내지 5%, 5% 내지 10%, 10% 내지 20%, 20% 내지 30% 또는 30% 내지 40%로 사용된다.

이와 관련하여, 본 발명은 또한 기초 제형 중의 폴리올의 부분을 에폭사이드-CO₂-유도된 폴리올로 치환시켜 폴리우레탄 접착제의 강도를 향상시키는 방법을 제공한다.

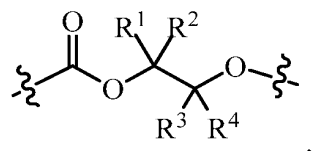
특정 구현예에서, 상기 방법은 기초 제형이 폴리에스테르 폴리올을 포함하는 기초 폴리우레탄 접착제 제형을 변형시킴을 포함한다. 상기 변형은 폴리에스테르 폴리올의 일부 분획을 이산화탄소와 하나 이상의 에폭사이드의 공중합으로부터 유도되고 다음 구조를 갖는 1차 반복 단위를 갖는 지방족 폴리카보네이트 폴리올로 치환시킴으로써 실행된다:



여기서, R¹, R², R³ 및 R⁴는 각각 상기 및 본원에서 부류 및 아부류에서 정의된 바와 같다.

특정 구현예에서, 치환된 폴리에스테르 폴리올의 분획은 약 2% 내지 약 50%이다. 특정 구현예에서, 상기 방법은 접착제 제형 중의 2% 내지 5%의 폴리에스테르 폴리올을 이산화탄소와 하나 이상의 에폭사이드와의 공중합으로부터 유도된 지방족 폴리카보네이트 폴리올로 치환시킴을 포함한다. 특정 구현예에서, 제형 중의 폴리에스테르 폴리올의 5% 내지 10%, 10% 내지 20%, 20% 내지 30%, 또는 30% 내지 50%가 치환된다.

특정 구현예에서, 상기 방법은 기초 제형이 폴리에테르 폴리올을 포함하는 기초 폴리우레탄 접착제 제형을 변형시킴을 포함한다. 상기 변형은 폴리에테르 폴리올의 일부 분획을 이산화탄소와 하나 이상의 에폭사이드의 공중합으로부터 유도되고 다음 구조를 갖는 1차 반복 단위를 갖는 지방족 폴리카보네이트 폴리올로 치환시킴으로써 실행된다:



여기서, R¹, R², R³ 및 R⁴는 각각 상기 및 본원에서 부류 및 아부류에서 정의된 바와 같다.

특정 구현예에서, 치환된 폴리에테르 폴리올의 분획은 약 2% 내지 약 50%이다. 특정 구현예에서, 상기 방법은 접착제 제형 중의 폴리에테르 폴리올의 2% 내지 5%를 이산화탄소와 하나 이상의 에폭사이드와의 공중합으로부터 유도된 지방족 폴리카보네이트 폴리올로 치환시킴을 포함한다. 특정 구현예에서, 제형 중의 폴리에테르 폴리올의 5% 내지 10%, 10% 내지 20%, 20% 내지 30%, 또는 30% 내지 50%가 치환된다.

상기 방법의 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 치환되는 폴리에스테르 또는 폴리에테르 폴리올과 실질적으로 동일한 OH#를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 치환되는 폴리에스테르 또는 폴리에테르 폴리올과 실질적으로 동일한 작용성 수를 갖는다. 특정 구현예에서, 지방족 폴리카보네이트 폴리올은 치환되는 폴리에스테르 또는 폴리에테르 폴리올과 실질적으로 상이한 OH#를 갖고(예를 들어, 5% 이상 상이하고, 10% 이상 상이하거나 25% 이상 상이하고), 상기 방법은 기초 제형에 대한 블렌딩된 폴리올의 OH#에서 생성되는 차이를 조절하기 위해 접착제 제형에 포함되는 이소시아네이트의 양을 조정하는 추가의 단계를 포함한다.

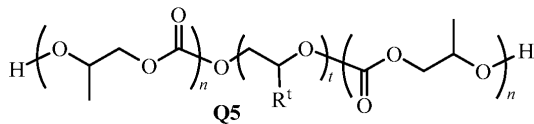
실시예

실시예 X 내지 Y를 위한 일반적 제형 및 시험 절차:

원료

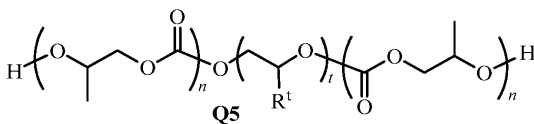
실시예 1 내지 5에 기술된 제형은 다음 원료를 사용한다:

- 분자량 약 800 내지 약 3000g/mol의 폴리프로필렌 카보네이트(PPC) 디올
 - 모든 폴리올의 다분산 지수는 <1.2였다.
 - 모든 폴리올은 디올 섀 전이제로 개시했다(즉, 그들은 화학식 **P2**이다).
 - 모든 디올은 어떤 불포화 또는 기타 작용성 없이 2.0 작용성이었다
 - 하이드록실은 약 85% 2차 및 15% 1차의 혼합물이다
- 분자량 2000g/mol의 선형 지방족 에틸렌/부틸렌 폴리에스테르 디올(EBD)
- 작용성 2.2(MM103)의 변형된 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)
- 에스테르계 이소시아네이트-말단화된 2개의 작용성 프리폴리머
- 통상적인 주석-형태 폴리우레탄 촉매
- 접착 촉진제 및 기타 첨가제
- 78-083은 디프로필렌 글리콜로 개시되고, 1,940g/mol의 Mn, PDI 1.06을 갖고, 99% 초과와 -OH 말단 그룹 및 >99% 카보네이트 결합(유발제 제외)을 함유하는 폴리(프로필렌 카보네이트) 폴리올이다. 이 물질은 화학식 **Q5**에 따르고,



여기서 R^t 는 메틸이고, t 는 2 이고, n 은 조성물에서 평균 약 8.8이다.

- 58-064는 디프로필렌 글리콜로 개시되고, 3,180g/mol의 Mn, PDI 1.04를 갖고, 99% 초과와 -OH 말단 그룹 및 >99% 카보네이트 결합(유발제 제외)을 함유하는 폴리(프로필렌 카보네이트) 폴리올이다. 이 물질은 화학식 **Q5**에 따르고,



여기서 R^t 는 메틸이고, t 는 2 이고, n 은 조성물에서 평균 15이다.

●

절차

다음 일반적 절차가 실시예 1 내지 5에 사용되었다:

- 폴리올을 가열하고, 2mm 진공하에 탈기시켜 잔류하는 휘발성 성분을 제거했다.
- 몇몇 경우에, 프리폴리머가 생성되었다. 실험이 프리폴리머를 요구할 때, 이는 특정 폴리올을 MM103과 반응 시킴으로써 제조되었다. 이러한 프리폴리머 성분을 완전히 혼합한 다음, 기포가 최소화될 때까지 2mm의 진공하에 다시 탈기시킨 다음, 반응을 완료시키기 위한 특정 온도 및 시간에 무수 질소로 블랭킷화했다.
- 프리폴리머의 경우, 잔류하는 미반응된 이소시아네이트 그룹은 표준 디부틸아민 적정 방법을 사용하여 측정했다.
- 필요할 경우, 이어서 폴리올의 효과적인 하이드록실 가를 최종 NCO 측정치로부터 "역 계산하여" 추가 실험을 위한 실질적인 기준을 수립했다.
- 일부 제형을 위해, 최종 중합체는 프리폴리머 단계를 우회하는 "원 샷" 접근법에 의해 제조되었다.
- 미반응된 이소시아네이트에 대해 특성화되면, 프리폴리머를 다양한 화학량론적 비에서 다양한 공-반응물을 사용하여 소정의 실험 제형으로 반응시켰다. 통상적으로, 모든 성분을 랩 믹서로 완전히 혼합한 후 최종 탈기가

또한 발생했다. 이어서, 혼합물을 특정된 바와 같이, 몇몇 경우에 경화 후, 또는 몇몇 경우에, 실질적인 경화가 발생하기 전에 결합 기관에 도포하여 핫 멜트 시스템 또는 2K 반응성 시스템을 생성했다.

● 또한, 핫 멜트 또는 반응성 시스템으로서 전망을 나타내는 제형의 경우, 시트 샘플은 최종 인장강도, 최종 신도 및 100%, 300% 및 500% 신도에서 응력 측정치를 포함하는 ASTM D412 특성을 시험하기 위해 제조했다.

● 인열 강도 측정은 ASTM D624 다이 C 및 ASTM D1938에 따라 수행했다.

실시예 1:

MM103을 갖는 프리폴리머는 PPC 74-083으로부터 측정된 NCO% 7.79까지 제조되었다. 최종 시스템은 차단된 디아민(듀라캐스트(Duracast) 3C-LF, 캄츄라(Chemtura)) 및 MDI로 제조했다. 시스템을 300F로 30분 동안 가열한 다음, 온도를 16시간 동안 275F로 감소시켰다.

결과: 275° F에서 경도는 75A였고 - 이 온도에서 PPC 디올이 유일한 거대 분자 성분이었던 임의의 기타 시스템보다 더 경질이다. RT에서, 시험편은 76D로 경화되었고, 취성이었다. 그러나, 이 기술을 사용하는 1K 시스템이 수분에 의존하지 않고 폴리우레탄 물질을 위한 매우 고온 서비스가 가능한 신속 경화 반응성 핫 멜트 접착제에 유망하다.

실시예 2:

폴리에스테르계 프리폴리머(MS242 프리폴리머, 바이엘(Bayer))를 PPC 폴리올계 프리폴리머(실시예1에 기술된 것과 유사하지만, PPC 58-064를 기초로 하고, NCO% 8.1%를 가짐)와 배합하고, 통상의 3급 아민 촉매 시스템(33LV, 다브코(Dabco)) 및 BDO(1,4-부탄 디올)로 경화시켰다. 제형은 30중량% PPC 폴리올이었다. 겔화 시간은 약 2분이었다. 다수의 시험 플라크를 생성했고(탈형 시간 약 1시간), 시험했다.

● ASTM D412 시험 결과(참조 도 9)

- 인장: 7,160 psi / 7,460 psi / 6,200 psi
- 신도 500% / 520%
- 계수: 100% 1,215 / 1215 psi; 300% 2,670 / 2,760 psi; 500% 7,160 / 6,840 psi
- 인장 세트: 500% + 신도 후 25%
- 듀로미터: 실온에서 85A

실시예 3:

실시예 2에 기술된 PPC 프리폴리머(NCO% 8.1)를 EBD와 반응시키고, 그 반응을 완료시킨 후, 이를 추가로 차단된 디아민과 반응시켰다. 이 제형에서, PPC는 총 중합체의 28중량%를 포함한다. 혼합물을 300F에서 금형 및 오븐에 배치시켰다. 1/2 시간 후, 물질은 견고하게 겔화되었다. 물질을 280F에서 4시간 동안 추가로 경화시킨 후, 경도는 275F에서 80A였다.

결과: RT에서 경도는 88A로 증가되었고, 강성이고 탄성이었다. 추가의 물질을 275F에서 밤새 경화시켰다. 275F에서 22시간 후, 물질은 81A로 측정되었고, RT에서 이의 경도는 85A로 증가되었다. 단일 인장 샘플을 시트로부터 절단하였고, 이를 RT로 냉각시킨 후 단지 2시간에 3860 psi를 측정하였고, 100% 모드는 단지 720 psi였고 열가소성을 나타냈다.

실시예 4:

HM4, HM5, HM6 및 HM7로 지정된 4개의 개별적 핫 멜트 제형은 대략 동일한 부분의 PPC 폴리올 및 EBD와 함께 동일 성분으로 배합되었다. 처음 3개는 반응성 핫 멜트였고, HM7은 진정한 핫 멜트였다. 이소 이론은 4개 제형에 걸쳐 변화되었다

결과: 이러한 제형 모두는 기관에 대해 상당한 결합을 가졌지만, 그들은 RT에서 매우 연질이었다. HM7은 영구적으로 점착성 점착체로서 사용될 수 있다. 경도의 완만한 증가와 함께, 이는 구두 밀창 점착체로서 이용가능할 수 있다.

실시예 5:

실시예 4와 유사한 제형을 EBD에 관한 PPC의 증가량(약 2:1)으로 제조했다. 이 시스템은 진정한 핫 멜트 및 반

응성 시스템 모두로서 시험하였다.

핫 멜트 결과: 목재에 대한 결합은 우수하였고; 알루미늄에 대한 결합은 매우 우수했고, 표준 상용 핫 멜트보다 더 나왔다. 듀로미터 경도는 연질 접착제 물질의 전형인 50A로의 급속한 낙하와 함께 75A였다.

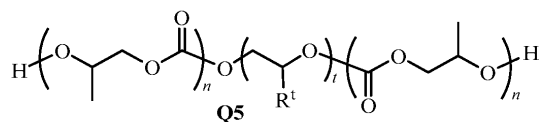
반응성 시스템 결과: 알루미늄, 강철, PVC, 나일론, 아크릴, 폴리카보네이트, 아세탈 및 ABS에 대한 결합은 균일하게 우수했다. 물리적 특성을 측정하였다. 인장 그래프는 중합체의 연속 점진적 항복과 함께 900% 이상의 매우 높은 신도를 나타냈고; D624, 다이 C 인열또 또한 약간의 항복을 나타내지만, 통상적으로 기대되는 바와 같은 갑작스런 실패는 없었다. 추가로, D1938 분할 인열은 인성을 나타내는 내인열성의 현저한 점진적 증가를 나타냈다. (참조: 도 10, 11 및 12). 접착제는 매우 연질인 접착제로서 다양한 기관에 대한 반응 시스템으로서 양호한 특성을 나타낸다. ASTM D1002 시험은 알루미늄 조각 상에서 300 psi의 LSS 결과를 유도했다. 시험에서, 응집성도 접착 실패도 없었다. 대신, 조각은 응력이 측정되는 시점에 시험의 확장 한계로 따로 열가소적으로 활주한다.

실시예 6:

실시예 1 내지 5에 기술된 연구를 토대로 하여, 신발류 및 텍스타일 적용을 표적으로 하는 2 성분 접착제 시스템을 배합했다. PPC 폴리올을 함유하는 우레탄 접착제 시스템의 성능을 PPC 폴리올이 없는 등가 시스템과 비교했다.

원료

- 1000 Mw 폴리프로필렌 카보네이트(PPC) 디올, 작용성 2.0, PDI <1.2, 및 85/15 2차/1차 하이드록실 그룹 이 물질은 화학식 Q5에 따르고,



여기서 R¹는 메틸이고, t는 1이고, n은 조성물에서 평균 약 4.5이다.

- 파놀람 피오탄 50-2000 EBA, 선형 지방족 폴리에스테르 디올 2000 Mw
- 작용성 2.2(MM103)의 변형된 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)
- 부탄디올 쇠 연장제

절차

대략 동일 비율의 PPC 폴리올과 EBA 폴리에스테르 폴리올의 조합인 7 내지 8% NCO 프리폴리머를 생성했다. 이어서, 제형의 폴리올 측을 완성된 접착제를 수득하기 위해 적용 후 프리폴리머와 완전히 반응시켰다. 경화 시간은 열로 가속시킬 수 있고, 대부분 접착제 결합 강도는 경시적으로 계속 증가한다. 제형은 100% VOC 비함유이다.

노보머(Novomer) 1000mw PPC 폴리올을 1000 Mw EBA 폴리에스테르 폴리올로 치환시킨 등가의 기준 접착제를 제조했다. 제형의 모든 다른 성분은 변경하지 않는다.

배합된 접착제 시스템은, 이들이 통상 텍스타일, 신발류, 스포츠 용품 및 기타 유사 용도에 사용되기 때문에, 혼합된 고무 및 EVA 기관 둘 다에 대해 시험했다.

결과

수득된 결과는 다음과 같다(참조: 도 13 및 14):

- 박리 시험 결과(혼합된 고무 기관)
 - o 약 36% 1000 Mw PPC 폴리올을 함유하는 배합 시스템: 3.2 kg/cm, 접착제 실패
 - o PPC 폴리올을 1000 Mw 폴리에스테르 폴리올로 치환한 등가 시스템: 1.45 kg/cm, 접착제 실패
- 박리 시험 결과(EVA 기관)
 - o 약 36% 1000 Mw PPC 폴리올을 함유하는 배합 시스템: >5-6 kg/cm, 기관 인열

표준 폴리에스테르계 2 성분 반응성 접착제에 PPC 폴리올의 첨가는 고무 기관에 대한 접착 강도를 2배 이상으로 한다. 동일한 PPC-계 시스템은 기관 실패를 유도하기에 충분한 강도로, EVA 기관에 대한 우수한 접착력을 나타냈다. 보다 광범위하게, 폴리(프로필렌 카보네이트) 골격은 다양한 적용 기회와 결합된 개선된 접착력 및 고강도 특성 모두를 부여하는 것으로 나타난다. PPC 폴리올은 기존 폴리에스테르 폴리올과 완전히 상용성이었고, 통상의 우레탄 촉매 및 기타 첨가제와 충분히 반응했다.

실시예 7:

실시예 7에서, 일련의 반응성 1-성분 접착제를 배합하고, 그들 성능의 정성적 평가를 완료했다. 이 실험에서, 측정된 OH # 181의 PPC 디올을 사용했다.

절차:

PPC 폴리올은 폴리올 대 이소시아네이트 대쇄 연장제의 1/2/1 당량 비로 배합하여 약 7.5% NCO의 프리폴리머를 생성했다. 먼저, 필요한 양의 2,4/4,4-MDI를 3구 플라스크에 칭량하였고, 80℃로 가열했다. 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 50℃로 가열하고, 반응 온도가 약 80℃에서 유지되는 속도로 교반하면서 이소시아네이트에 첨가했다. 모든 폴리올을 첨가한 후, 교반하면서 추가의 3시간 동안 계속 가열했다. 프리폴리머를 보틀로 옮기고, 무수 N₂하에 밀봉시켰다. 프리폴리머 조성물을 이하 제시한다.

노보머 폴리올 2,4-MDI

1/2/1	308	250
-------	-----	-----

NCO 함량 %를 측정하고 이론적으로 계산된 값과 비교하였고, 양호하게 일치하는 것으로 나타났다.

이어서, 프리폴리머를 랩 전단 시험(접착 결합된 금속 시험편 ASTM D1002의 랩 전단 강도)에 적용한다. 1인치 너비 냉간 압연 강판은 1/2" 마크에 표시한다. 10g의 프리폴리머를 준비하고, 0.1g의 유리 스페이서 비드를 첨가하고, 내부 혼합한다. 이어서, 혼합물을 1/2" x 1" 영역 내의 금속 조각 중의 하나 위에 도포하고, 제2 조각을 제1 조각에 1/2" 중첩시키고, 2개의 조각을 함께 고정시키고, 실온에서 72시간 동안 경화되도록 방치했다. 3개의 샘플을 각 프리폴리머를 위해 제조했다. 72시간 동안 경화시킨 후, 시험편을 인스트론에 고정시키고, 분리하였다.

실시예 8:

실시예 8에서, 일련의 반응성 2-성분 접착제를 배합하였고, 그들 성능의 정성적 평가를 완료하였다. 이 실시예에서, 측정된 OH # 181을 갖는 620 Mw PPC 디올을 2개의 상이한 제형에 폴리올 대이소시아네이트 대쇄 연장제의 당량비 1/2/1 내지 1/3.5/1로 배합하여 각각 약 7% 및 약 14% NCO 프리폴리머를 생성했다. 먼저, 필요한 양의 2,4/4,4-MDI를 3구 플라스크에 칭량하고, 80℃로 가열했다. 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 점도가 너무 높아 용이하게 부을 수 없을 경우 50℃까지 또는 약간 더 높게 가열했다. 폴리올을 반응 온도가 약 80℃에서 유지되는 속도로 교반하면서 이소시아네이트에 첨가했다. 폴리올을 모두 첨가한 후, 추가의 3시간 동안 교반하면서 계속 가열했다. 프리폴리머를 보틀로 옮기고, 무수 N₂하에 밀봉시켰다. 프리폴리머 조성물을 이하 제시한다.

노보머 폴리올 2,4-MDI

1/2/1	308	250
1/3.5/1	308	437.5

NCO 함량 %를 측정하고 이론적으로 계산된 값과 비교하였고, 양호하게 일치하는 것으로 나타났다.

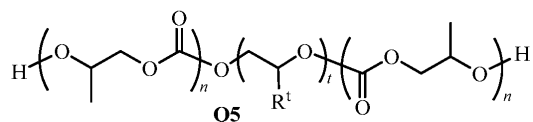
프리폴리머 1 당량 폴리올/ 3.5 당량 MDI의 % NCO				
	이론적 %NCO	측정된 %NCO		평균
		1	2	
폴리올				
Poly G 20-181	14.05	12.63	12.56	12.60
PTMEG 650	13.74	13.48	13.42	13.45
CAPA 2067A	13.81	13.84	13.78	13.81
노보머	14.09	13.70	13.64	13.67

이어서, 프리폴리머를 랩 전단 시험(접착 결합된 금속 시험편 ASTM D1002의 랩 전단 강도)에 적용한다. 1in 너비 냉간 압연 강판을 1/2" 마크에 표시했다. 10g의 프리폴리머 및 동량의 부탄디올을 함께 혼합한 다음, 0.1g의 유리 스페이서 비드를 첨가하고, 혼합하고, 최종적으로 1방울의 주석 촉매(T-9)를 첨가하고, 내부 혼합했다. 이어서, 혼합물을 1/2" x 1" 영역 내의 금속 조각 중의 1개 위해 도포하고, 제2 조각을 제1 조각에 1/2" 중첩시키고, 두 조각을 함께 고정시키고, 실온에서 72시간 동안 경화되도록 방치했다. 3개의 샘플을 각 프리폴리머를 위해 제조했다. 72시간 동안 경화시킨 후, 시험편을 인스트론에서 고정시키고, 분리하였다.

실시예 9:

이 실시예에서, 목적은 폴리우레탄 접착제에서 CO₂-계 폴리(프로필렌-카보네이트) 디올(PPC 디올) 노보머 58-076의 성능을 결정하는 것이었다.

NOV-58-076은 디프로필렌 글리콜로 개시되고, 816g/mol의 Mn, PDI 1.15를 갖고, 99% 초과와 -OH 말단 그룹 및 >99% 카보네이트 결합(유발제 제외)을 함유하는 폴리(프로필렌 카보네이트) 폴리올이다. 이 물질은 화학식 Q5에 따르고,



여기서, R^t는 메틸이고, t는 2이고, n은 조성물에서 평균 약 3.3이다.

2-성분 접착제를 노보머 58-076 폴리올,쇄 연장제로서 1,4-BD 및 4,4'-MDI 이소시아네이트로 MDI/폴리올/쇄 연장제 당량비 2.02/1/1로 배합했다. 참조로서, 2 성분 폴리우레탄 접착제를 에테르나콜(Eternacoll) UH-50 폴리 카보네이트 폴리올, 1, 4-BD쇄 연장제 및 4,4'-MDI 이소시아네이트를 사용하여 및 폼레즈(Fomrez) 44-160 폴리 에스테르 폴리올, 1, 4-BD쇄 연장제 및 4,4'-MDI 이소시아네이트를 사용하여 배합했다. 모든 폴리우레탄 시스템은 동일한 경질 단편 농도로 배합했다.

폴리올 및쇄 연장제(이미 탈기시킴)를 70℃에서 예열하고, 스피드 믹서 컵에 칭량하고, 벤조일 클로라이드를 첨가하고, 모든 성분을 스피드 믹서(FlackTek Inc.)를 통해 2200rpm에서 60초 동안 혼합했다(성분 B). 혼합물을 추가로 15분 동안 70℃에서 조절했다.

필요한 양의 용융 MDI를 시린지에 배치하고, 70℃에서 조절했다(성분 A).

금속 플레이트를 120℃에서 조절했다. 성분 A를 성분 B에 첨가하고, 모든 성분을 스피드 믹서를 통해 20초 동안 2200rpm에서 혼합했다. 혼합 직후, 약 0.075g의 수지를 각 플레이트의 중첩 면적의 중심에 배치했다. 겔화 시간 전에, 두 플레이트를 중첩 면적을 통해 결합시키고, 클램프로 밀폐시키고, 120℃에서 2시간에 이어, 110℃에서

20시간 동안 경화되도록 방지했다. 샘플을 시험 전에 5일 동안 실온 상태에서 노화되도록 방지했다.

2-성분 폴리우레탄 접착제는 직쇄 이소시아네이트 4,4'-MDI인 성분 A와 폴리올, 채 연장제 및 소량의 벤조일 클로라이드의 혼합물인 성분 B로 이루어졌다. 에테르나콜 UH-50-계 시스템의 겔화 시간은 너무 빨라서 접착제 샘플의 제조시 취급할 수 없었다. 벤조일 클로라이드를 소량으로 첨가하여 겔화 시간을 약간 증가시켰다.

NCO- 프리폴리머를 기초로 하는 2 성분 폴리우레탄 시스템도 또한 너무 빨랐고(겔화 시간 60초), 또한 접착제 샘플의 실험실 제조에 실용적이지 않았다.

노보머 58-076 폴리올 및 에테르나콜 UH-50을 기초로 하는 두 형태의 폴리우레탄 접착제는 낮은항복 변형률(약 2% 변형률)과 함께 유사한 응력-변형률 특성을 나타냈다. 실온에서 접착성은 또한 근접했다. 그러나, 노보머 58-076을 기초로 하는 접착제는 에테르나콜 UH-50으로 제조된 접착제와 비교하여 예기치 않게도 70°C에서 훨씬 우수한 접착 강도 유지율을 나타냈다. 노보머 58-076 접착제의 70°C에서 항복 응력의 유지는 에테르나콜 UH-50 접착제의 29%와 비교하여 61%였다. 70°C에서 노보머 58-076 접착제의 항복 변형률은 실온에서와 비교할 때 약간 증가하였다. 항복 변형률은 에테르나콜 UH-50 폴리올계 접착제의 경우에는 감소되었다.

2-성분 폴리카보네이트 PU 접착제의 특성에 대한 온도의 효과

접착제의 유형	UH-50 (50% HS)	노보머 58-076 (50% HS)
실온에서의 특성		
실패에서의 하중, N/mm ²	1166 ± 156	1850 ± 266
파단 인장 에너지, in-lbf/in ³	17 ± 2	27 ± 4
모듈러스, psi	181099 ± 31962	188948 ± 19184
항복 응력, psi	3566 ± 120	3542 ± 164
항복 변형률, %	2.10 ± 0.17	2.19 ± 0.16
50°C에서의 특성		
실패에서의 하중, 50°C, N/mm ²	429 ± 52	2631 ± 317
파단 인장 에너지, 50°C, in-lbf/in ³	1.676 ± 0.063	67 ± 17
모듈러스, 50°C, psi	105243 ± 9918	109948 ± 10556
항복 응력, 50°C, psi	1854 ± 210	2707 ± 155
항복 변형률, 50°C, %	2.13 ± 0.06	3.05 ± 0.46
70°C에서의 특성		
실패에서의 하중, 70°C, N/mm ²	251 ± 17	586 ± 62
파단 인장 에너지, 70°C, in-lbf/in ³	0.431 ± 0.068	3.03 ± 0.76
모듈러스, 70°C, psi	128160 ± 17070	117612 ± 22535
항복 응력, 70°C, psi	1039 ± 89	2174 ± 109
항복 변형률, 70°C, %	1.02 ± 0.15	2.75 ± 0.54

또한, 노보머 폴리올은 내용매성, 투명성 및 일련의 기관에 대한 접착력을 포함하는 다수의 추가성능 영역에서 순조롭게 실행되었고---이러한 결과는 도 1 내지 7에 요약된다.

노보머 PPC와 폴리에스테르 폴리올을 20 내지 58%의 범위에 걸쳐 (순수한 물질에 대해 상기한 것들과 유사한 제형을 사용하여) 블렌딩함으로써, 일련의 연질 및 경질 접착제가 제조되었다. 이러한 제형의 특성의 요약은 도 8에 제시된다.

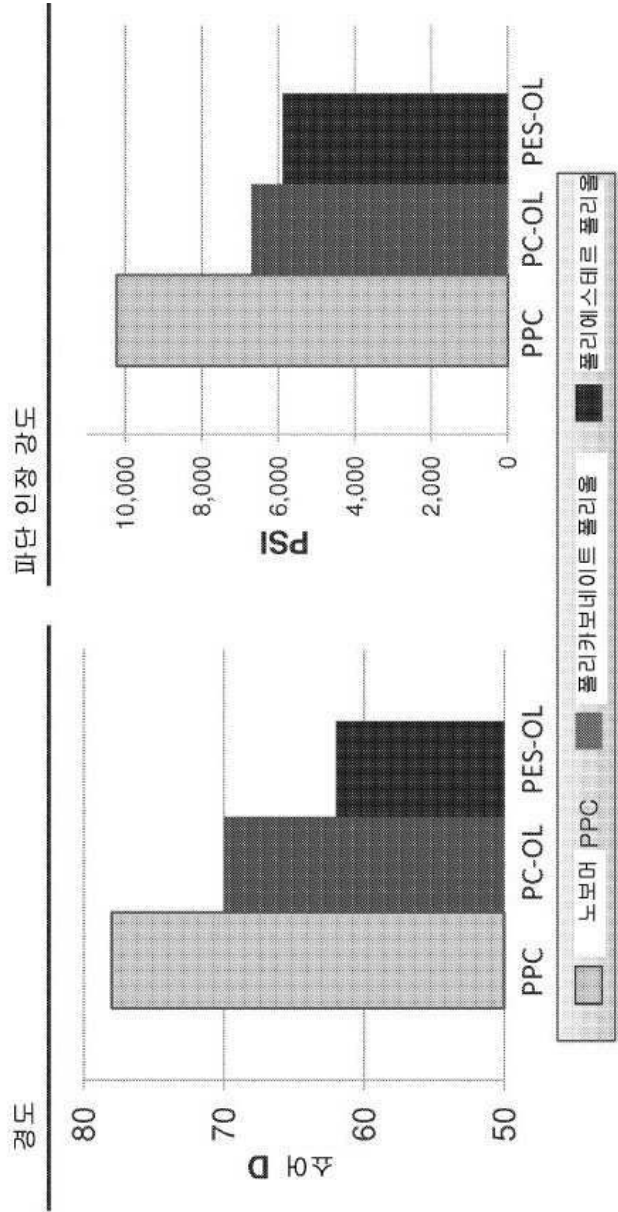
표 2: 폴리카보네이트 폴리카올을 기반으로 한 2-성분 폴리우레탄 접착제의 배합물 및 특성				
접착제의 유형	노보데 58-076 (50% HS)		UH-50 (50% HS)	
배합물 (pbw)				
성분 B				
노보데 58-076	14.025		13	
1,4 부탄 디올	2.052		2.381	
벤조일 클로라이드	3 방울		3 방울	
성분 A				
은두르 M	11.949		11.522	
경질 세그먼트, %	50		50	
접착제 샘플 제조				
성분 온도, °C	70		70	
겔 시간	3 ~4 분		100 s	
경화 시간 및 온도	120°C에서 2시간		120°C에서 2시간	
후경화 시간 및 온도	110°C에서 20시간		110°C에서 20시간	
		특성의 보유 (70°C/RT) %		특성의 보유 (70°C/RT) %
접착제 특성, 실온				
실온에서의 하중, N/mm ²	1850 ± 266		1166 ± 156	
표단 인장 에너지, in-lbf/in ³	27 ± 4		17 ± 2	
모듈러스, psi	188948 ± 19184		181099 ± 31962	
항복 응력, psi	3542 ± 164		3566 ± 120	
항복 변형률, %	2.19 ± 0.16		2.10 ± 0.17	
접착제 특성, 70°C				
실온에서의 하중, 70°C, N/mm ²	586 ± 62	32	251 ± 17	21
표단 인장 에너지, 70°C, in-lbf/in ³	3.03 ± 0.76	11	0.431 ± 0.068	2.5
모듈러스, 70°C, psi	117612 ± 22535	62	128160 ± 17070	71
항복 응력, 70°C, psi	2174 ± 109	61	1039 ± 89	29
항복 변형률, 70°C, %	2.75 ± 0.54	125	1.02 ± 0.15	50

등가물

특허 및 특허 출원을 포함하지만, 이에 국한되지 않는 본원에 인용된 모든 자료는, 이러한 문헌 및 유사 자료의 포맷과 무관하게, 이들의 전문이 본원에 명백하게 참조로 인용된다. 정의된 용어, 용어 사용법, 기재된 기술 등을 포함하지만, 이에 국한되지 않는 인용된 문헌 및 유사 자료 중의 하나 이상이 본원과 상이하거나 모순되는 경우, 이 적용은 제어한다.

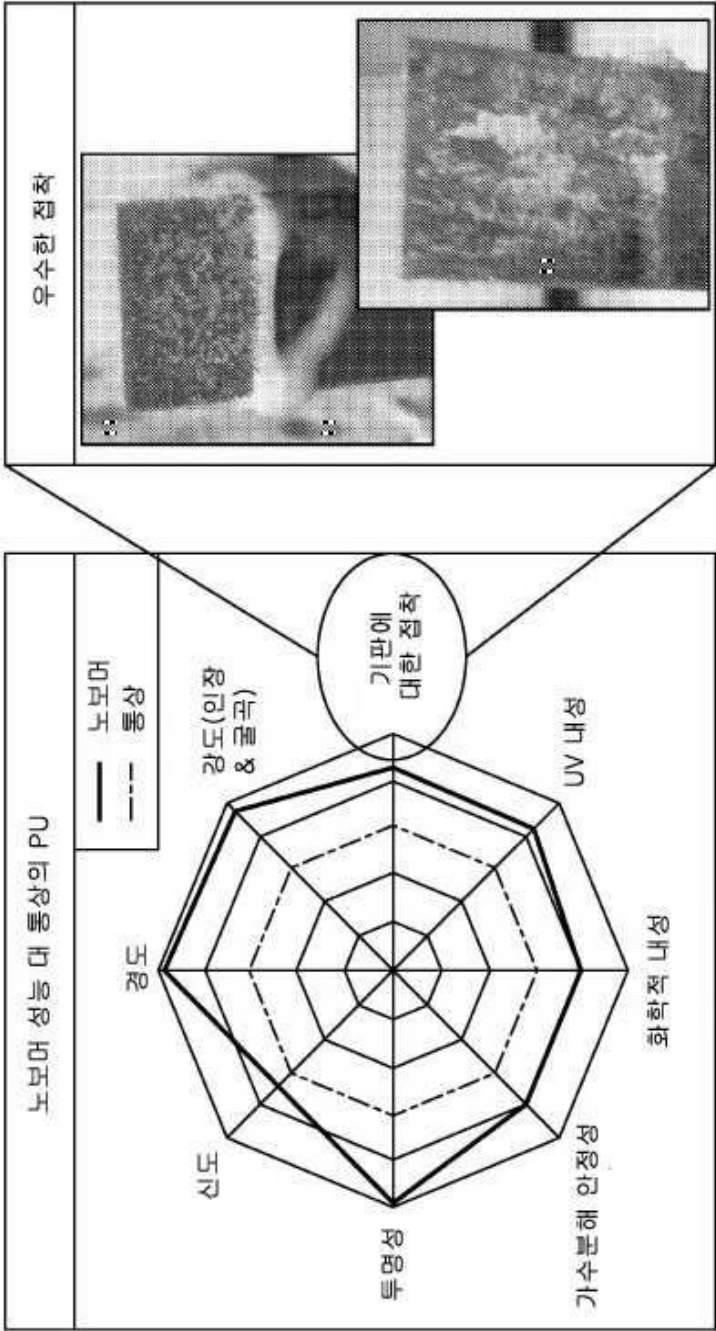
도면
도면1

TPU에서 PPC의 초기 평가는 매우 고강도 및 인장 강도를 나타냈다



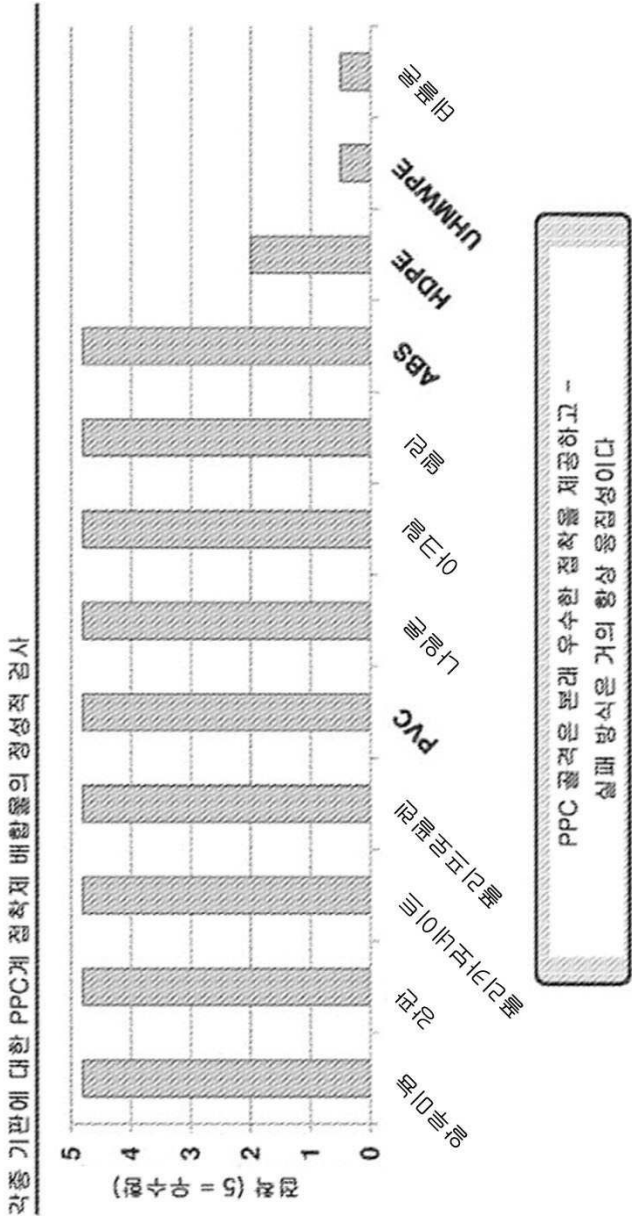
도면2

코팅, TPU & 발포체의 추가의 조시는 우수한 접착제 특성을 나타낸다



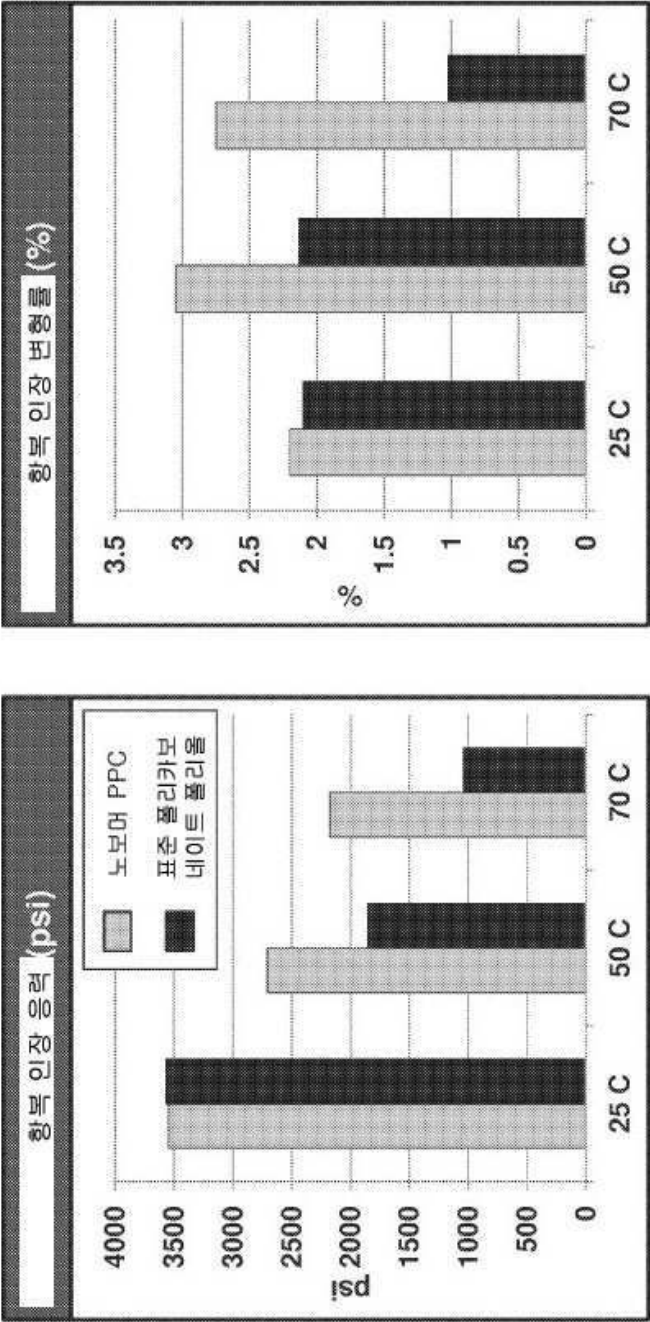
도면3

대부분 기판에 대한 접착은 우수하다



배합물 주의: 2:1 PPC/폴리에스테르 폴리올 및 2.2 Fn 변형된 4.4 MDI, 58중량% PPC를 함유하는 배합 시스템
시험 주의: 샘플을 신속하게 MEK로 닦고, 접착제를 실온에서 적용한 다음, 형상 약 100℃에서 경화시킨다

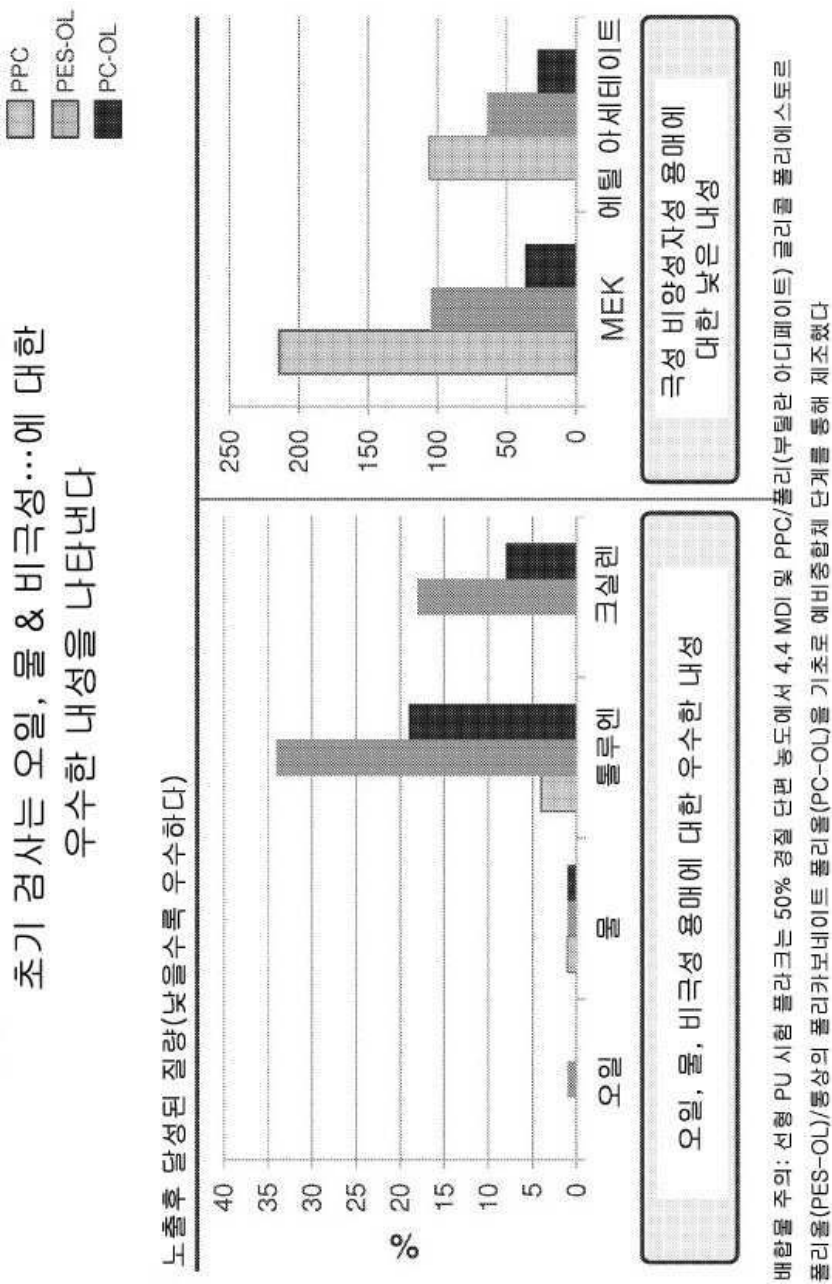
PPC는 기존 폴리카보네이트 플리울에 대한 온도
에 걸친 우수한 강도 유지를 전달한다



배합물 주의: 원-샷 선행 PU 접착제 배합물은 쇠 연장제로서 BDO 및 젤화 시간을 증가시키기 위한 첨가제로서 벤조일 클로라이드와 함께 50% 경질 단편 농도에서 4,4 MDI 및 PPC/용상의 PC-OL을 기초로 한다

시험 주의: 실패 방식은 모든 경우에 전착성(응집성이 아님)이다

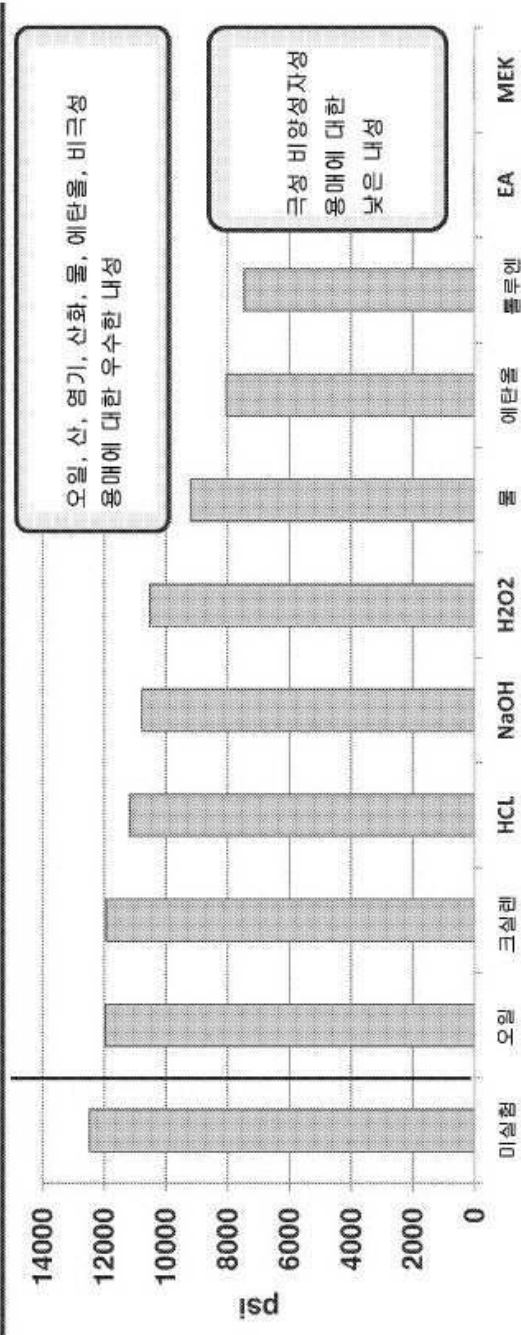
도면5



도면6

..및 추가의 시험은 노출 후 물리적 특성의 우수한 유지를 확인했다

7일 노출 후 PPC-계 PU 시험 플라크의 인장 강도 유지

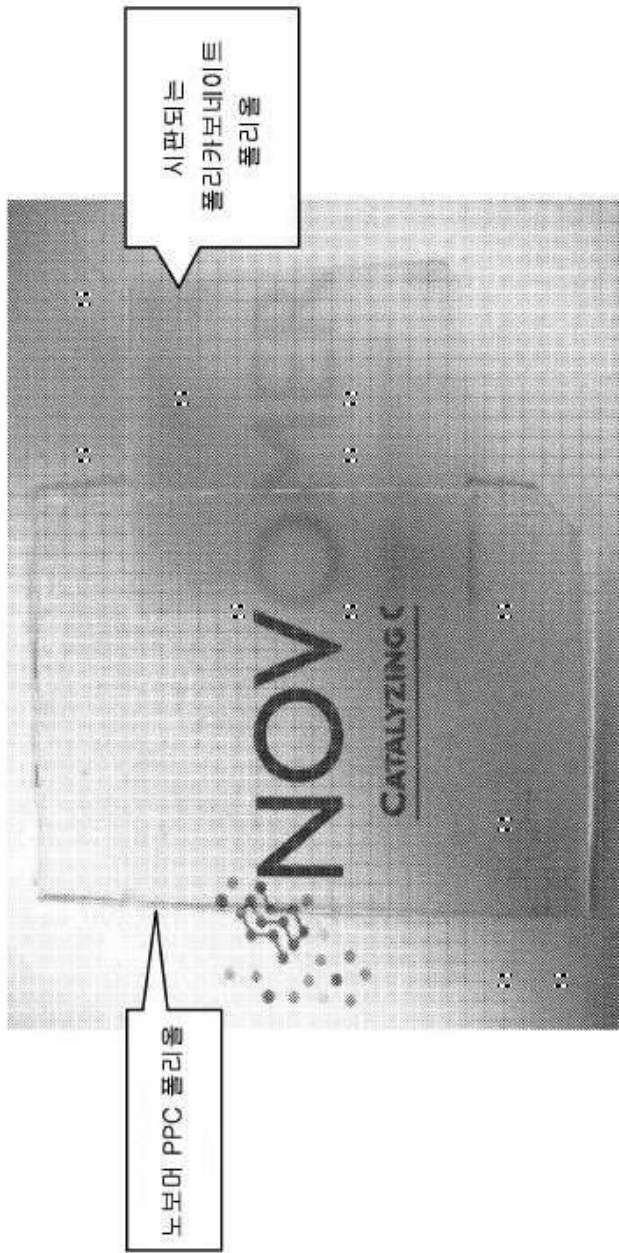


배합물 주의: 선형 PU 시험 플라크는 새 연정제로서 BDO와 함께 50% 경질 단편 농도에서 4,4 MDI 및 PPC를 기초로 하는 예비중합체 단계를 통해 제조했다

시험 주의: 모든 샘플을 H2O2를 제외하고 실온에서 7일 동안 침지시켰고, 이는 2주 동안 규칙적으로 변경시켰다

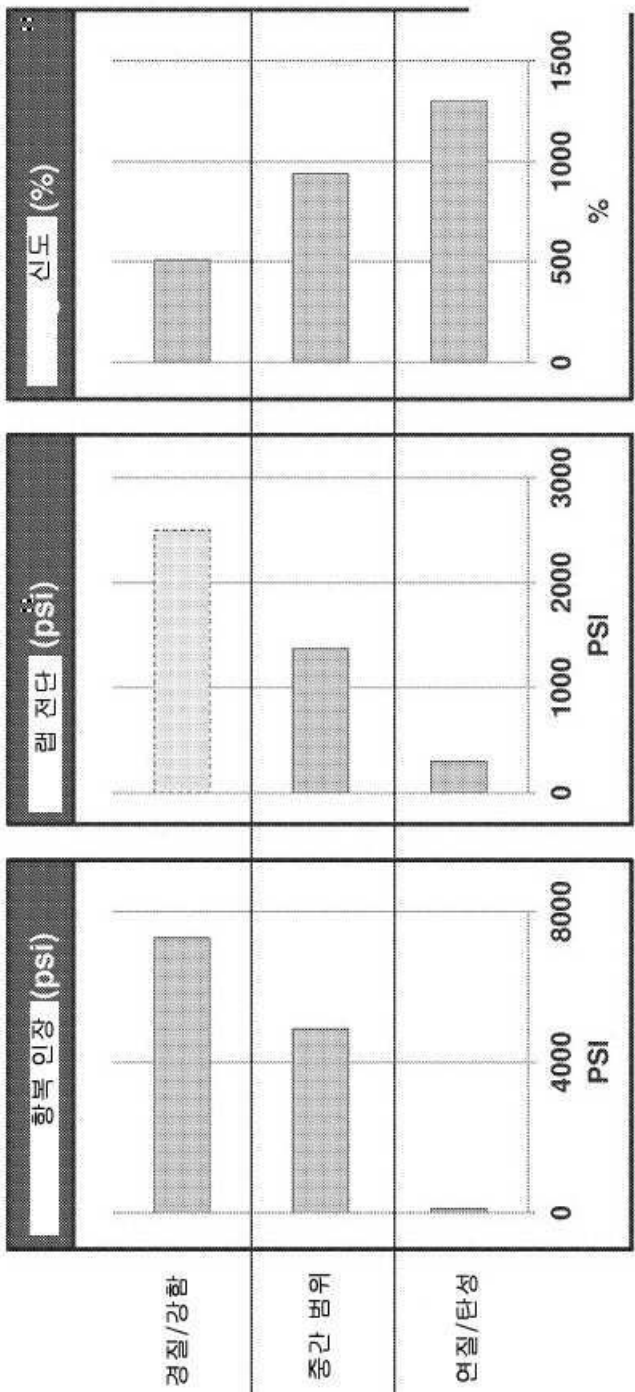
도면7

PPC 폴리올은 투명한 우레탄 시스템을 생성한다



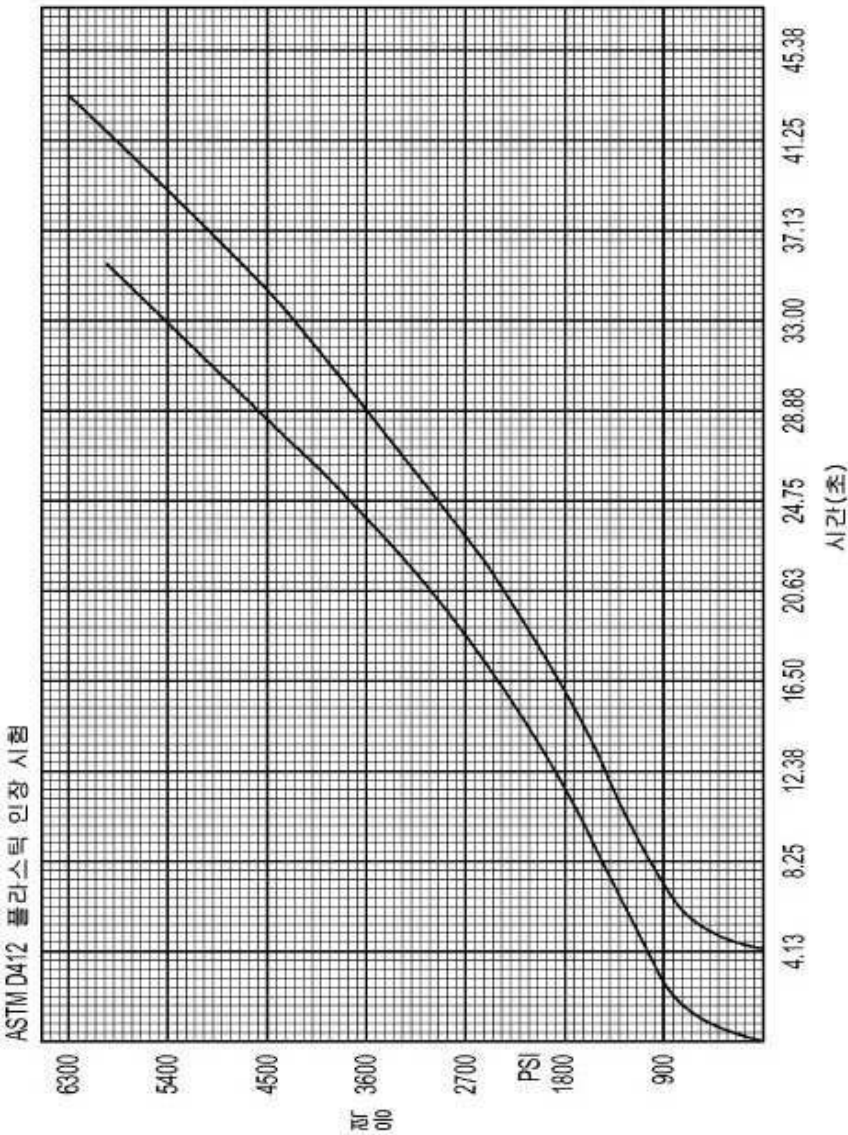
도면8

광범위한 범위의 연질 및 경질 접착제는 PPC 폴리올을
기초로 하여 배합될 수 있다

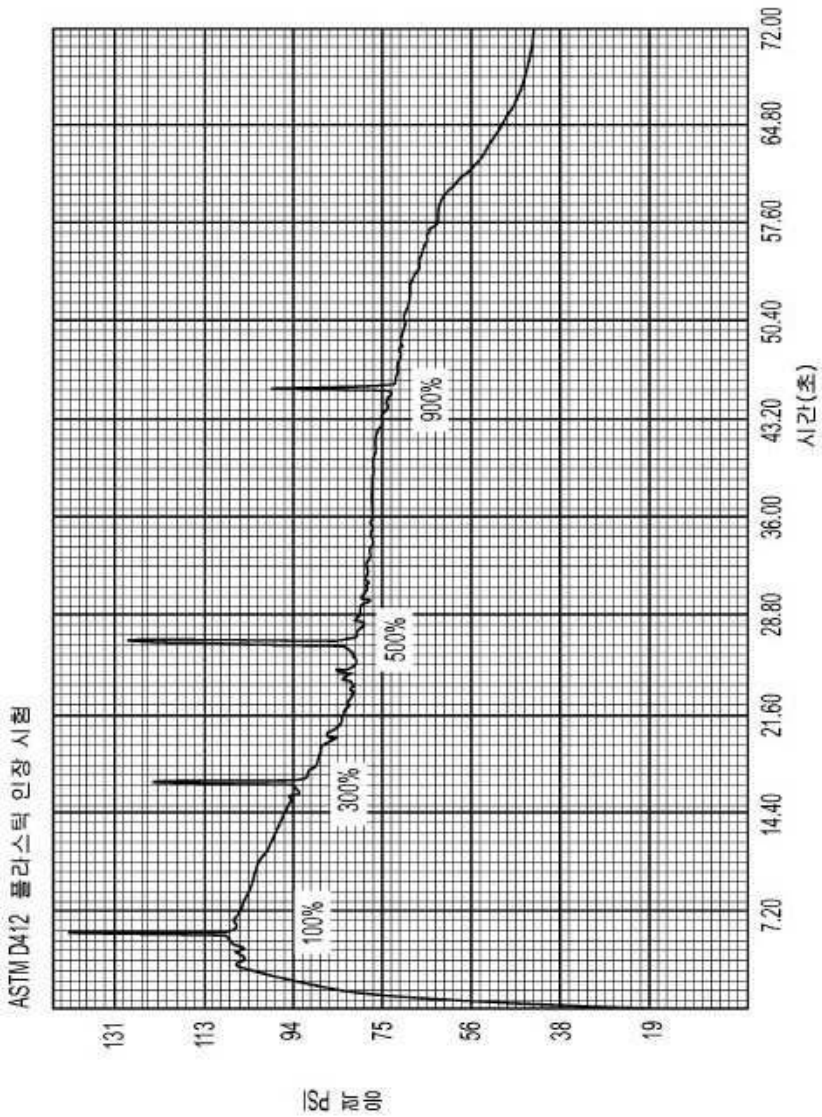


배합물 주의: PPC 농도는 기타 성분으로서 폴리에스테르 폴리올 및 4,4 MDI와 함께 20에서 58중량%로 변한다.

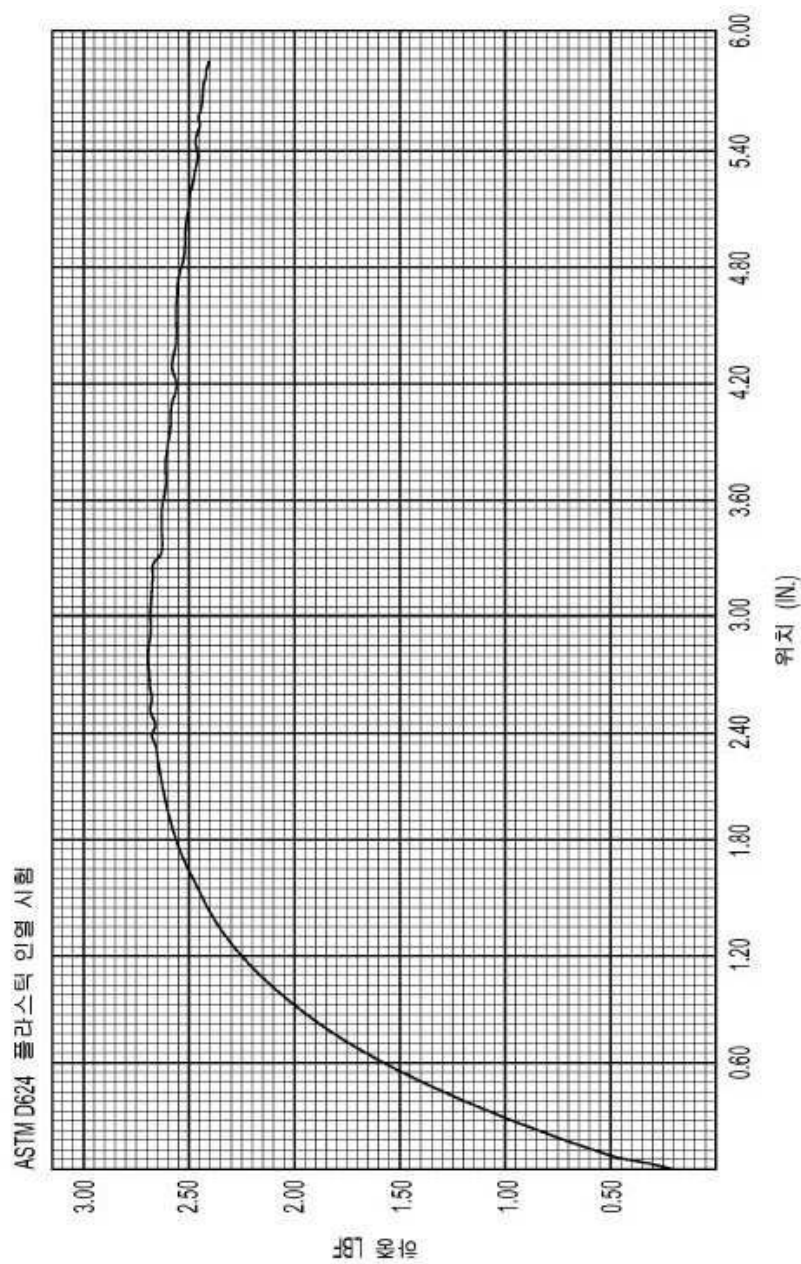
도면9



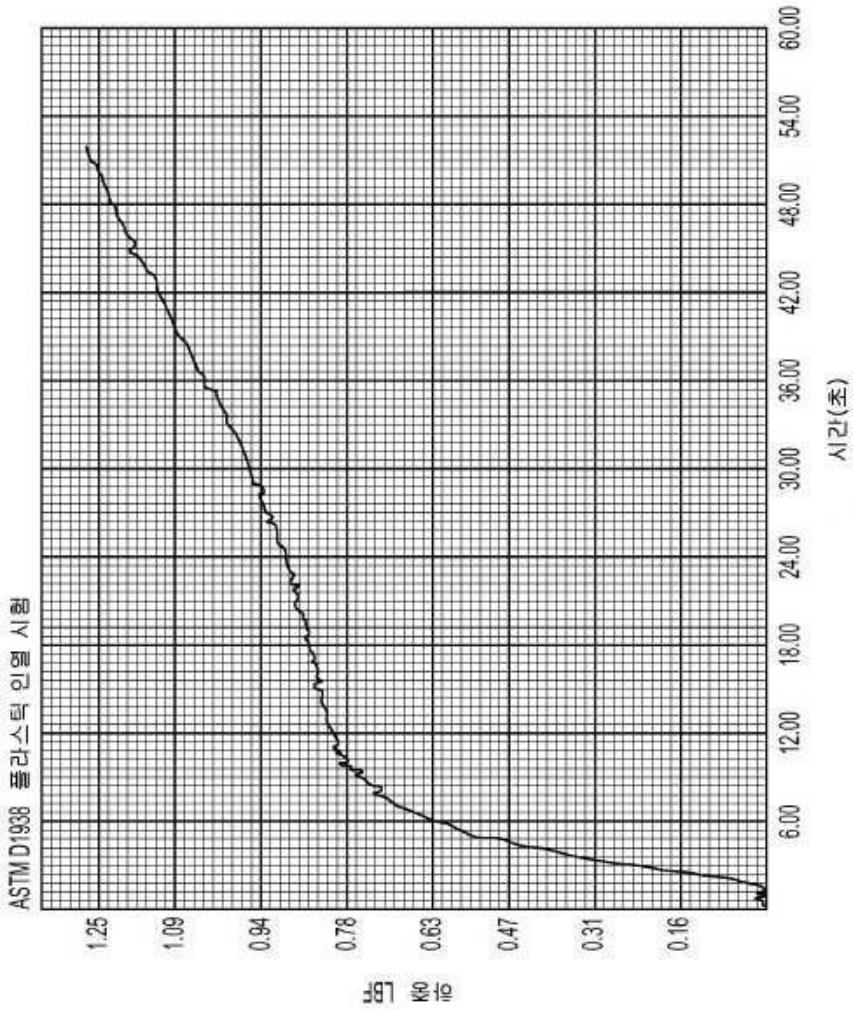
도면10



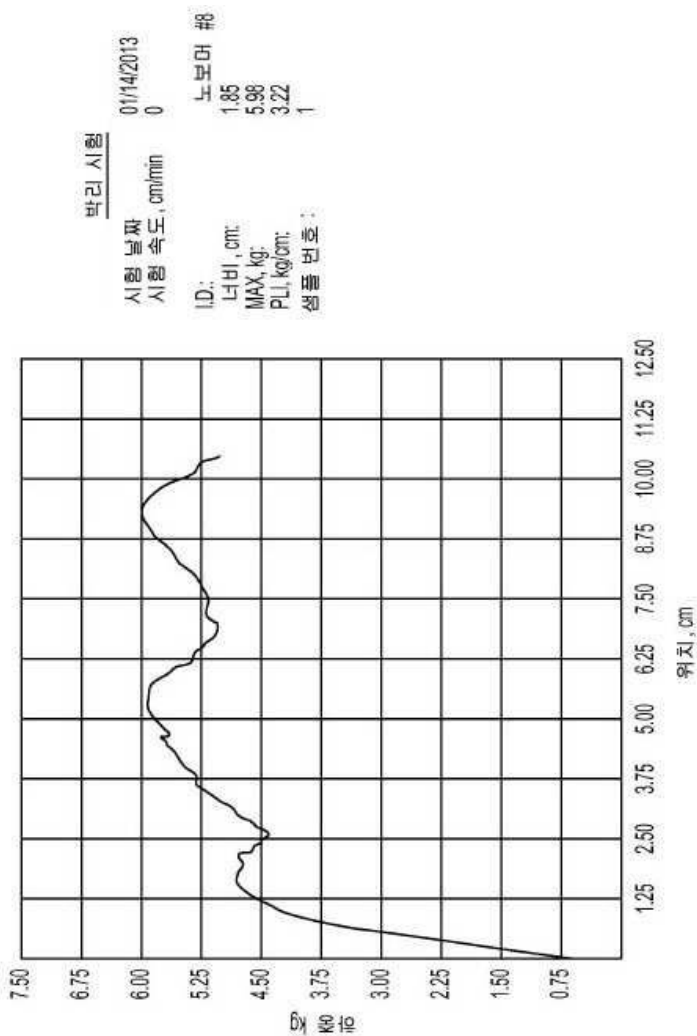
도면11



도면12



도면13



도면14

