



①9



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA

①1 Número de publicación: **2 347 590**

⑤1 Int. Cl.:
C08K 5/00 (2006.01)

①2

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

⑨6 Número de solicitud europea: **06814807 .1**

⑨6 Fecha de presentación : **18.09.2006**

⑨7 Número de publicación de la solicitud: **1945703**

⑨7 Fecha de publicación de la solicitud: **23.07.2008**

⑤4 Título: **Envase y composición con mejores propiedades de barrera al gas.**

③0 Prioridad: **05.10.2005 US 723751 P**

④5 Fecha de publicación de la mención BOPI:
02.11.2010

④5 Fecha de la publicación del folleto de la patente:
02.11.2010

⑦3 Titular/es: **The Coca-Cola Company**
One Coca-Cola Plaza, N.W.
Atlanta, Georgia 30301, US
Eastman Chemical Company

⑦2 Inventor/es: **Shi, Yu;**
Schloss, Francis, M. y
Weemes, Doyle, A.

⑦4 Agente: **Elzaburu Márquez, Alberto**

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín europeo de patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre concesión de Patentes Europeas).

Campo de la invención

Esta invención se refiere a una bebida envasada, y más en particular a potenciar las propiedades de barrera al dióxido de carbono y al oxígeno de un envase para una bebida envasada, de forma que se aumente la vida en anaquel de su contenido, incorporando un aditivo en el poli(tereftalato de etileno) (PET) y sus copoliésteres.

Antecedentes de la invención

El poli(tereftalato de etileno) y sus copolímeros (en lo sucesivo denominados de forma colectiva como "PET") se usan ampliamente para hacer envases para refrescos carbonatados, zumo, agua y similares, debido a la excelente combinación de propiedades de transparencia, mecánicas y de barrera a los gases. A pesar de estas características deseables, la insuficiente barrera a los gases del PET, al oxígeno y dióxido de carbono, limita la aplicación del PET para envases de tamaño más pequeño, así como para envasar productos sensibles al oxígeno, tales como cerveza, zumo y productos de té. En la industria del envasado se ha expresado la necesidad de mejorar más las propiedades de barrera a los gases del PET.

La permeabilidad relativamente alta del PET al dióxido de carbono limita el uso de envases de PET más pequeños para envasar refrescos carbonatados. La velocidad de permeación del dióxido de carbono a través de los envases de PET está en el intervalo de 3 a 14 cm³ por día o una velocidad de pérdida de 1,5 a 2 por ciento por semana a temperatura ambiente, dependiendo del tamaño del envase. Un envase más pequeño tiene una relación mayor de área superficial a volumen dando como resultado una velocidad de pérdida relativa mayor. Por este motivo, los envases de PET se usan actualmente solo como envases más grandes para envasar refrescos carbonatados, mientras que se eligen las latas metálicas y envases de vidrio para los envases de refrescos carbonatados más pequeños.

La cantidad de dióxido de carbono que queda en un refresco carbonatado envasado determina su vida en anaquel. Normalmente, los envases de refrescos carbonatados se llenan con aproximadamente 4 volúmenes de dióxido de carbono por volumen de agua. Se acepta en general, que un refresco carbonatado envasado llega al final de su vida en anaquel cuando se ha perdido el 17,5 por ciento del dióxido de carbono en el envase debido a la permeación del dióxido de carbono a través de las paredes laterales y el cierre del envase. La permeabilidad del PET al dióxido de carbono determina, por lo tanto, la vida en anaquel de la bebida carbonatada envasada y por lo tanto, la idoneidad del PET como un material de envasado.

Se han desarrollado numerosas tecnologías o se están desarrollando para potenciar la barrera del PET a moléculas de gas pequeñas. Por ejemplo, se han desarrollado recubrimientos externos o internos para potenciar la barrera a los gases de los envases de PET. La capa de recubrimiento normalmente es una capa de barrera muy alta, inorgánica u orgánica, y ralentiza la difusión de gases. Sin embargo, la implementación de esta tecnología requiere un equipo de recubrimiento que normalmente no se usa en la fabricación de bebidas envasadas y por lo tanto requiere una inversión de capital sustancial, mayor uso de energía, y más espacio de suelo. En muchas industrias de envasado de bebidas que ya están muy llenas, el espacio adicional no es una opción.

También se han desarrollado los envases de multicapas con una capa de barrera alta interpuesta entre dos o más capas de PET. La implementación de esta tecnología también requiere una inversión de capital sustancial y la deslaminación de las capas del envase tiene impacto en el aspecto, la barrera y características mecánicas de los envases.

Un aditivo de barrera para el PET o un polímero con propiedades de barrera inherentes serían soluciones preferidas. Ninguna de estas soluciones requiere la inversión adicional de capital, y por lo tanto, no tienen limitaciones inherentes con otras tecnologías. También se puede añadir un aditivo de barrera durante el procedimiento de moldeo por inyección que da más flexibilidad para las operaciones corriente abajo.

L. M. Robeson y J.A. Faucher describen en *J. Polymer Science, Part B* 7, 35-40 (1969), que se pueden incorporar algunos aditivos en los polímeros para aumentar su módulo y propiedades de barrera a los gases mediante un mecanismo de antiplastificación. Este artículo describe el uso de aditivos con policarbonato, poli(cloruro de vinilo), poli(óxido de fenileno) y poli(óxido de etileno).

El documento WO 02/13612 describe composiciones de compuestos de yodonio en combinación con un polímero. Las composiciones tienen actividad biológica.

El documento GB 1434828 describe composiciones que comprenden purina y una resina. Las composiciones presentan propiedades ignífugas.

En el documento WO 01/12521, Plotzker et al. proponen el uso de aditivos seleccionados de 4-hidroxibenzoatos y moléculas relacionadas para aumentar las propiedades de barrera del PET. Esta solicitud de patente publicada describe aditivos de barrera de la siguiente estructura:

HO-AR-COOR, HO-AR-COOR1COO-AR-OH, HO-AR-CONHR, HO-AR-CO-NHR3-COO-AR-OH, HO-AR-CONHR2NHCO-AR-OH

En la estructura anterior, AR se selecciona del grupo que consiste en fenileno o naftaleno sustituido o no sustituido. Y R1, R2 y R3 se seleccionan del grupo que
5 consiste en grupos alquilo C1 a C6, un grupo fenilo y un grupo naftilo.

Los aditivos anteriores descritos en la técnica proporcionan solo mejora moderada en la barrera del PET, menos de 2,1 veces (X) para la barrera al oxígeno para los mejores ejemplos con un 5 por ciento en peso de nivel de carga. Sin embargo, con este nivel de carga el PET sufre una degradación sustancial y una
10 disminución significativa de la viscosidad intrínseca (VI). Aunque la disminución del nivel de aditivo reduce la degradación del PET, también reduce el factor de mejora de la barrera tanto que no existe beneficio real en el uso de estos aditivos en el envasado de refrescos carbonatados o alimentos sensibles al oxígeno. Parte de la pérdida de VI se debe a la adición del aditivo molecular pequeño. Se produce pérdida adicional de VI
15 cuando los aditivos contienen grupos funcionales capaces de reaccionar con el PET y causar la degradación del peso molecular. Los aditivos con grupos funcionales reactivos normalmente son más solubles en PET y por lo tanto no imparten turbidez a la botella. El PET con una VI significativamente más baja no se puede usar en envases de moldeo por soplado, tales como envases de bebidas. Además, el PET con
20 VI más baja hace que el envase tenga características mecánicas pobres, tales como deformación permanente, impacto en caída, y similares. Además, los envases de PET hechos de PET con VI menor tienen poca resistencia a agrietarse por tensión, lo cual es indeseable en aplicaciones de envases.

El PET se ha modificado o mezclado con otros componentes para potenciar la
25 barrera a los gases del PET. Los ejemplos incluyen copolímeros o mezclas de poli(naftalenato de etileno) (PEN)/PET, PET modificado con isoftalato (IPA), PET mezclado con poli(isoftalato de etileno) (PEI) o una poliamida, tal como nailon, y PET modificado con dioles basados en resorcinol. Para que un copolímero de PET alcance una potenciación de la barrera moderada de 2X o superior, la modificación
30 normalmente es mayor de 10 a 20 por ciento en peso o en moles de los comonómeros totales. Cuando el PET se modifica a dicho nivel alto, las características de estiramiento del PET cambian notablemente de forma que no se podría usar el diseño de preforma de envase de PET normal en la fabricación de envases. El uso de estos copolímeros de PET para moldear preformas de envases de PET convencionales da
35 como resultado preformas que no se pueden estirar completamente y los últimos

envases son muy difíciles de hacer, si no imposible. Incluso si se puede hacer dicho envase, no presenta características de barrera mejoradas y presenta características físicas deterioradas de modo que no se puede usar para envasar refrescos carbonatados. Las patentes de EE.UU. 5.858.598 y 6.150.450 describen preformas de
5 envases de PET rediseñadas con paredes laterales más gruesas para compensar la mayor relación de estiramiento. Sin embargo, esta preforma más gruesa requiere moldes nuevos, lo cual requiere una inversión adicional. La preforma más gruesa también se hace con una velocidad de productividad menor porque se tarda más en enfriar y calentar la preforma de pared más gruesa. Además, las mezclas de PET con
10 poliamida tal como el nailon, desarrollaban amarillamiento y enturbamiento y no son transparentes como el PET convencional.

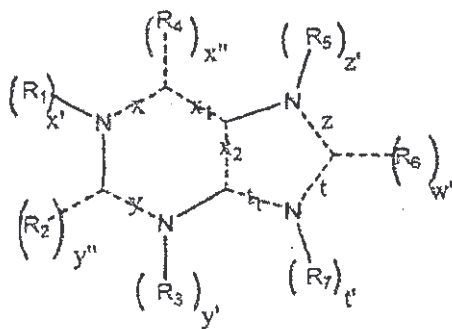
Por lo tanto, es necesario en la técnica potenciar la característica de barrera del PET para usar en aplicaciones que requerirán una barrera potenciada, tal como en el envasado de bebidas carbonatadas y bebidas y alimentos sensibles al oxígeno, de
15 una forma que no produzca una degradación sustancial del PET, que no impacte sustancialmente en la relación de estiramiento del PET, y que no impacte de forma negativa en la transparencia del PET.

Sumario de la invención

Esta invención se dirige a las necesidades descrita antes, proporcionando un
20 envase de poliéster con propiedades potenciadas de barrera a los gases, que comprende una composición de poliéster compuesta de poliéster y un derivado de purina.

De acuerdo con una realización particular, el poliéster en la composición de poliéster comprende un copolímero basado en poli(tereftalato de etileno) (copolímero
25 de PET). En una realización particular, el poliéster comprende un copolímero de PET que tiene menos de 20 por ciento de modificación de componente diácido y/o menos de 10 por ciento de modificación de componente diol, basado en 100 por cien en moles de componente diácido y 100 por cien en moles de componente diol.

La composición de poliéster comprende un derivado de purina que tiene la
30 estructura química de fórmula I



en la que R_1 , R_3 , R_5 , y R_7 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo arilamino, alcoxi, ariloxi, alquenilo, alquinilo, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo;

en la que t , t_1 , x , x_1 , x_2 , y , y z , independientemente entre sí, son un enlace sencillo o un doble enlace; en la que t' , x' , y' , y z' , independientemente entre sí, son 0 ó 1; en la que x'' , y'' , y w' , independientemente entre sí, son 1 ó 2;

en la que cuando x es un doble enlace, x_1 es un enlace sencillo; en la que cuando x_1 es un doble enlace, x y x_2 son enlaces sencillos; en la que cuando x_2 es un doble enlace, x_1 y t_1 son enlaces sencillos; en la que cuando t es un doble enlace, t_1 y z son enlaces sencillos; en la que cuando z es un doble enlace, t es un enlace sencillo; en la que cuando t_1 es un doble enlace, t y x_2 son enlaces sencillos; en la que cuando x es un doble enlace, x' es 0; en la que cuando x o x_1 es un doble enlace, x'' es 1; en la que cuando y es un doble enlace, y' es 0 e y'' es 1; en la que cuando t o t_1 es un doble enlace, t' es 0; en la que cuando z y t son enlaces sencillos, w' es 2; en la que cuando z o t es un doble enlace, w' es 1; en la que cuando z es un doble enlace, z' es 0; en la que cuando x , y o z , independientemente entre sí, es un enlace sencillo, y x' , y' o z' independientemente entre sí, es 1;

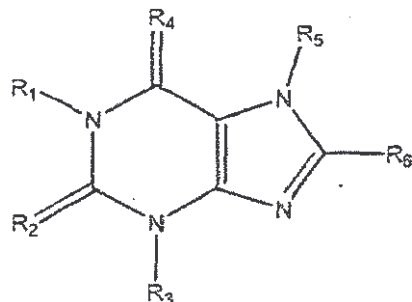
en la que R_2 , R_4 y R_6 , independientemente entre sí, pueden ser restos unidos por un enlace sencillo o doble;

en la que cuando R_2 , R_4 o R_6 es un resto unido por un enlace sencillo, R_2 , R_4 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazina, carbamilo, ácido fosfórico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo;

en la que cuando R_2 , R_4 o R_6 es un resto unido por un doble enlace, R_2 , R_4 o R_6 , independientemente entre sí, comprende oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ; R_8 y R_9 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, suifinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo; y R_{10} comprende un hidrógeno, grupo arilamino, alcoxi, ariloxi, alquenilo, alquinilo, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo; y

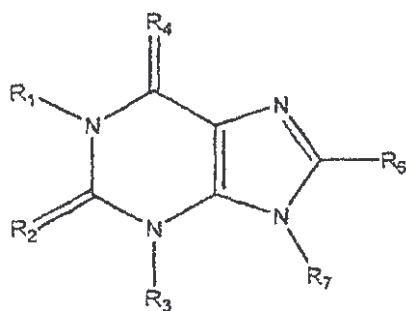
en la que cuando x'' es 2, ambos restos R_2 pueden ser iguales o diferentes; en la que cuando y'' es 2, ambos restos R_4 pueden ser iguales o diferentes; y en la que cuando w' es 2, ambos restos R_6 pueden ser iguales o diferentes.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula II



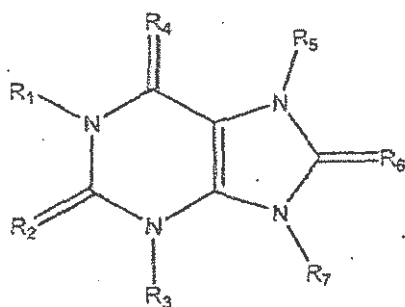
en la que t_1 , x , x_1 , y , y z son enlaces sencillos; en la que x_2 y t son dobles enlaces; en la que w' , x' , y' , z' , x'' , e y'' son 1; en la que t' es 0; en la que R_2 y R_4 , independientemente entre sí, son restos unidos por un doble enlace que comprenden oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ; y en la que R_1 , R_3 , R_5 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula III



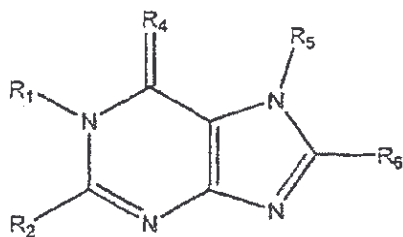
- en la que x, x₁, y y t y t₁ son enlaces sencillos; en la que x₂ y z son dobles enlaces; en la que t', w', x', x'', e y'' son 1; en la que z' es 0; en la que R₂ y R₄, independientemente entre sí, son restos unidos por un doble enlace que comprenden
- 5 oxígeno, azufre, CR₈R₉, SO₂ o NR₁₀; y en la que R₁, R₃, R₆ y R₇, independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o
- 10 un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula IV



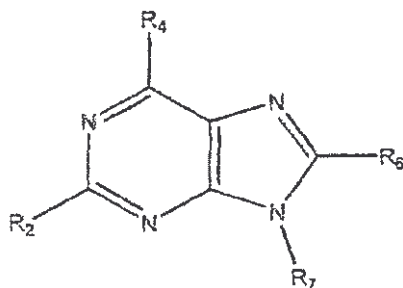
- 15 en la que x, x₁, y, t, t₁ y z son enlaces sencillos; en la que x₂ es un doble enlace; en la que t', w', x', y', z', x'' e y'' son 1; en la que R₂, R₄ y R₆, independientemente entre sí, son restos unidos por un doble enlace, que comprenden oxígeno, azufre, CR₈R₉, SO₂ o NR₁₀; y en la que R₁, R₃, R₅ y R₇, independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo,
- 20 sulfonilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula V



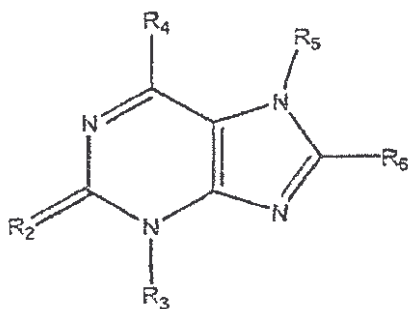
5 en la que x, x₁, t₁ y z son enlaces sencillos; en la que x₂, t e y son dobles enlaces; en la que w', x', z', x'' e y'' son 1; en la que y' y t' son 0; en la que R₄ es un resto unido por un doble enlace, que comprenden oxígeno, azufre, CR₈R₉, SO₂ o NR₁₀; y en la que R₁, R₂, R₅ y R₆, independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula VI



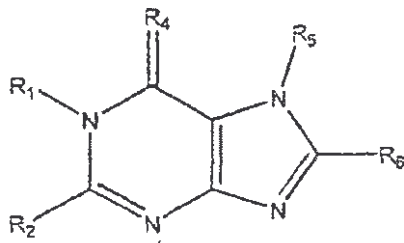
15 en la que x, x₂, y, y z son dobles enlaces; en la que x₁, t y t₁ son enlaces sencillos; en la que t', w', x'' e y'' son 1; en la que x', y' y z' son 0; y en la que R₂, R₄, R₆ y R₇ comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

25 En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula VII



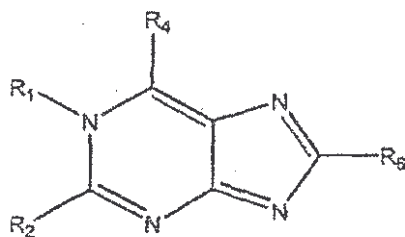
- en la que x , x_2 , y t son dobles enlaces; en la que t_1 , x_1 , y y z son enlaces sencillos; en la que w' , y' , z' , x'' e y'' son 1; en la que t' y x' son 0; en la que R_2 es un resto unido por un doble enlace, que comprende oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ;
- 5 y en la que R_3 , R_4 , R_5 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal,
- 10 ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula VIII



- en la que x_2 , y, y t son dobles enlaces; en la que x , x_1 , t_1 , y z son enlaces sencillos; en la que w' , x' , z' , x'' e y'' son 1; en la que t' e y' son 0; en la que R_4 es un resto unido por un doble enlace, que comprende oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ;
- 15 y en la que R_1 , R_2 , R_5 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal,
- 20 ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula IX



en la que x_1 , y , t_1 y z son dobles enlaces; en la que x , x_2 y t son enlaces sencillos; en la que w' , x' , x'' e y'' son 1; en la que t' , y' y z' son 0; en la que R_1 , R_2 , R_4 y R_6 independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

Además, en otra realización de la invención, la etapa de formar el envase comprende el moldeo por estirado-soplado. Realizaciones particulares de esta invención proporcionan envases de poliéster, tales como envases de PET, con barrera a los gases potenciada, y en particular barrera potenciada a los gases al dióxido de carbono y al oxígeno. Esto hace de algunas realizaciones de la invención particularmente adecuadas para envasar refrescos carbonatados y bebidas y alimentos sensibles al oxígeno. Las realizaciones particulares logran esta barrera a los gases potenciada mientras que mantienen propiedades físicas y de transparencia aceptables.

Otros objetos, características y ventajas de la invención serán evidentes a partir de la siguiente descripción detallada y las reivindicaciones.

Breve descripción de los dibujos

La figura 1 es un diagrama esquemático de un sistema para hacer un envase de PET con barrera a los gases potenciada de acuerdo con una realización de esta invención.

La figura 2 es una vista de sección transversal de una preforma de envase moldeada hecha de acuerdo con una realización de esta invención.

La figura 3 es una vista de sección transversal de un envase moldeado por sopado hecho a partir de la preforma de la figura 2, de acuerdo con una realización de esta invención.

La figura 4 es una vista en perspectiva de una bebida envasada hecha de acuerdo con una realización de esta invención.

Descripción detallada de la invención

Esta invención abarca un envase de poliéster con propiedades de barrera a los gases potenciadas. Los envases de poliéster y los métodos para hacer dichos envases hechos de acuerdo con las realizaciones de esta invención se describen además a
5 continuación y en las figuras 1-4 que acompañan.

I. Composición de poliéster

Esta invención se puede aplicar a cualquier poliéster y es adecuada para usos en los que se desea una barrera a los gases alta. Los poliésteres adecuados para usar en realizaciones de esta invención incluyen copolímeros de PET, poli(naftalato de
10 etileno) (PEN), poli(isoftalato de etileno) y similares. Los copolímeros de PET son particularmente útiles porque se usan para muchas aplicaciones de barrera tales como películas y envases. Los envases adecuados incluyen, pero sin limitar, botellas, barriles, garrafas, neveras portátiles y similares.

Los copolímeros de PET adecuados para usar en realizaciones de esta
15 invención comprenden un componente diol que tiene unidades que se repiten de etilenglicol y un componente diácido que tiene unidades que se repiten de ácido tereftálico. En realizaciones particulares, el copolímero de PET tiene menos de 20 por ciento de modificación de diácido, 10 por ciento de modificación de glicol, o ambos, basado en 100 por cien en moles de componente diácido y 100 por cien en moles de
20 componente diol. Dichos copolímeros de PET son bien conocidos.

Los poliésteres, incluyendo copolímeros de PET, tienen volumen libre entre las cadenas de polímero. Como conocen los expertos en la técnica, la cantidad de volumen libre en poliésteres tales como los copolímeros de PET, determina su barrera a moléculas de gas. Cuanto menor es el volumen libre, menor es la difusión de gas y
25 mayor la barrera a moléculas de gases. De forma conveniente, el aditivo potenciador de la barrera a los gases se dispone al menos parcialmente en el volumen libre del poliéster entre cadenas de poliéster.

En una realización particular, una composición de poliéster comprende un poliéster y un aditivo de barrera a los gases potenciada que comprende un derivado
30 de purina, que se describe más a continuación. El derivado de purina de la composición de poliéster potencia las propiedades de barrera a los gases de la composición de poliéster con niveles de carga bajos, de forma conveniente en el intervalo de aproximadamente 0,2 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la composición de poliéster, más convenientemente en el intervalo de aproximadamente
35 3 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la composición de poliéster y todavía

de forma más conveniente en el intervalo de aproximadamente 3 a aproximadamente 5 por ciento en peso de la composición de poliéster. Con niveles de carga bajos, se produce un factor de mejoramiento de la barrera (BIF, por sus siglas en inglés *barrier improvement factor*) pequeño. Aunque el mejoramiento en el BIF es sustancial con niveles de carga altos, las propiedades físicas del PET se deterioran y hacen que sea más difícil formar un envase. El BIF es una medida de las propiedades de barrera a los gases potenciadas (la relación de la velocidad de transmisión de gas de una composición de poliéster sin un aditivo a la velocidad de transmisión de gas de una composición de poliéster con aditivo).

10 De acuerdo con otra realización, la composición de poliéster comprende:

a) un poliéster presente en la composición de poliéster en una cantidad en el intervalo de aproximadamente 90 a aproximadamente 99,8 por ciento en peso de la composición de poliéster; y

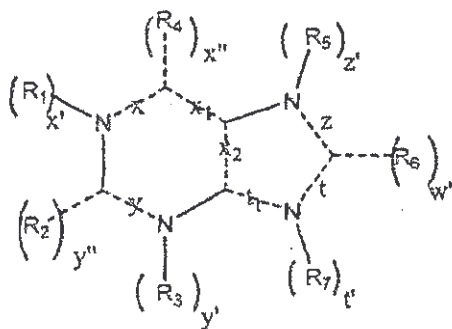
15 b) un derivado de purina presente en la composición de poliéster en una cantidad en el intervalo de aproximadamente 0,2 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la composición de poliéster.

20 En una realización particular, el poliéster comprende un copolímero basado en poli(tereftalato de etileno) que tiene menos de 20 por ciento de modificación de diácido, 10 por ciento de modificación de glicol, o ambas, basado en 100 por cien en moles de componente diácido y 100 por cien en moles de componente diol.

En otra realización particular, el derivado de purina está presente en la composición de poliéster en una cantidad en el intervalo de aproximadamente 3 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la composición de poliéster. En otra realización particular, el derivado de purina está presente en la composición de poliéster en una cantidad en el intervalo de aproximadamente 3 a aproximadamente 5 por ciento en peso de la composición de poliéster.

II. Derivados de purina

En una realización particular, un derivado de purina tiene la estructura química de la fórmula I



en la que R_1 , R_3 , R_5 , y R_7 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo arilamino, alcoxi, ariloxi, alquenilo, alquinilo, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo;

en la que t , t_1 , x , x_1 , x_2 , y , y z , independientemente entre sí, son un enlace sencillo o un doble enlace; en la que t' , x' , y' , y z' , independientemente entre sí, son 0 ó 1; en la que x'' , y'' y w' , independientemente entre sí, son 1 ó 2;

en la que cuando x es un doble enlace, x_1 es un enlace sencillo; en la que cuando x_1 es un doble enlace, x y x_2 son enlaces sencillos; en la que cuando x_2 es un doble enlace, x_1 y t_1 son enlaces sencillos; en la que cuando t es un doble enlace, t_1 y z son enlaces sencillos; en la que cuando z es un doble enlace, t es un enlace sencillo; en la que cuando t_1 es un doble enlace, t y x_2 son enlaces sencillos; en la que cuando x es un doble enlace, x' es 0; en la que cuando x o x_1 es un doble enlace, x'' es 1; en la que cuando y es un doble enlace, y' es 0 y y'' es 1; en la que cuando t o t_1 es un doble enlace, t' es 0; en la que cuando z y t son enlaces sencillos, w' es 2; en la que cuando z o t es un doble enlace, w' es 1; en la que cuando z es un doble enlace, z' es 0; en la que cuando x , y o z , independientemente entre sí, es un enlace sencillo, y x' , y' o z' independientemente entre sí, es 1;

en la que R_2 , R_4 y R_6 , independientemente entre sí, pueden ser restos unidos por un enlace sencillo o doble;

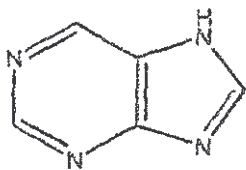
en la que cuando R_2 , R_4 o R_6 es un resto unido por un enlace sencillo, R_2 , R_4 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinito, sulfamilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazina, carbamilo, ácido fosfórico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo;

en la que cuando R_2 , R_4 o R_6 es un resto unido por un doble enlace, R_2 , R_4 o R_6 , independientemente entre sí, comprende oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 , o NR_{10} ; R_8 y R_9 , independientemente entre sí comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, suifinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, grupo heterocíclico o acilo; y R_{10} comprende un hidrógeno, arilamino, alcoxi, ariloxi, alquenilo, alquinilo, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

En la que cuando x'' es 2, ambos restos R_2 pueden ser iguales o diferentes; en la que cuando y'' es 2, ambos restos R_4 pueden ser iguales o diferentes; y en la que cuando w' es 2, ambos restos R_6 pueden ser iguales o diferentes.

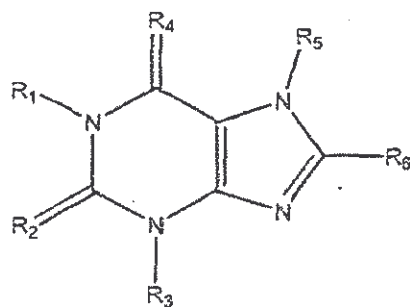
Los restos descritos antes pueden estar además sustituidos, como conoce el experto en la técnica, por un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, suifinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, y cualquier otro grupo funcional viable.

En una realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende la 7H-purina, que tiene la estructura química



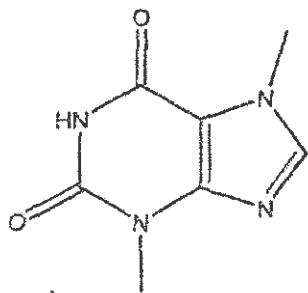
en la que x , x_2 , y , y t son doble enlaces; en la que x_1 , t_1 y z son enlaces sencillos; en la que x' , y' , y t' son 0; en la que x'' , y'' , z'' y w' son 1; y en la que R_2 , R_4 , R_5 , y R_6 son hidrógeno.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula II



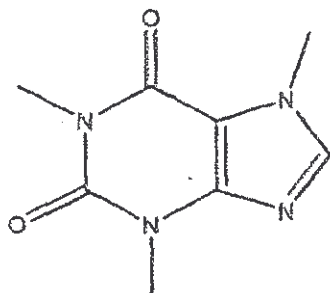
en la que t₁, x, x₁, y, y z son enlaces sencillos; en la que x₂ y t son dobles enlaces; en la que w', x', y', z', x'', e y'' son 1; en la que t' es 0; en la que R₂ y R₄, independientemente entre sí, son restos unidos por un doble enlace, que comprenden un oxígeno, azufre, CR₈R₉, SO₂ o NR₁₀; y en la que R₁, R₃, R₅ y R₆, independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinito, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo, en los que los restos pueden estar además sustituidos como se ha descrito antes.

En una realización particular del compuesto de fórmula II, el derivado de purina comprende teobromina, una purina diona que tiene la estructura química



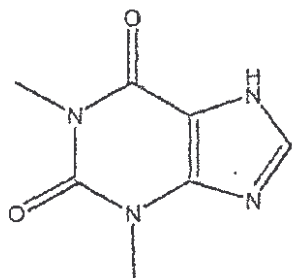
en la que R₁ y R₆ son hidrógeno; en la que R₂ y R₄ son oxígeno; y en la que R₃ y R₅ son metilo.

En otra realización del compuesto de fórmula II, el derivado de purina comprende cafeína, una purina diona que tiene la estructura química



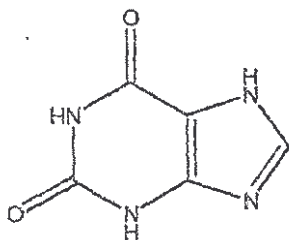
en la que R_6 es hidrógeno; R_2 y R_4 son oxígeno; y R_1 , R_3 y R_5 son metilo.

En otra realización más del compuesto de fórmula II, el derivado de purina comprende teofilina, una purina diona que tiene la estructura química



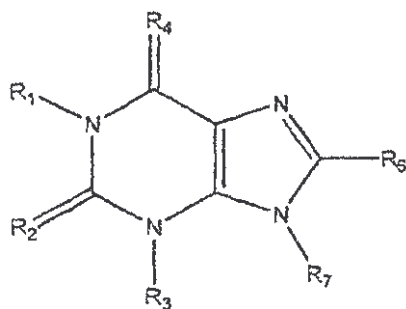
- 5 en la que R_5 y R_6 son hidrógeno; en la que R_2 y R_4 son oxígeno; y en la que R_1 y R_3 son metilo.

En otra realización más del compuesto de fórmula II, el derivado de purina comprende xantina, una purina diona que tiene la estructura química



- 10 en la que R_1 , R_3 , R_5 y R_6 son hidrógeno; y R_2 y R_4 son oxígeno.

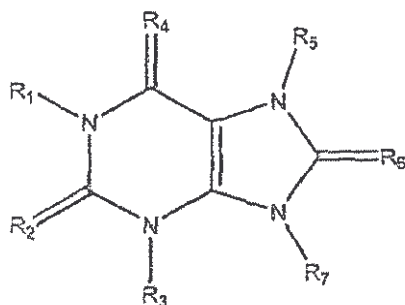
En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula III



- 15 en la que x , x_1 , y , y y t y t_1 son enlaces sencillos; en la que x_2 y z son dobles enlaces; en la que t' , w' , x' , x'' e y'' son 1; en la que z' es 0; en la que R_2 y R_4 , independientemente entre sí, son restos unidos por un doble enlace, que comprenden oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ; y en la que R_1 , R_3 , R_6 y R_7 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto,
- 20 imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o

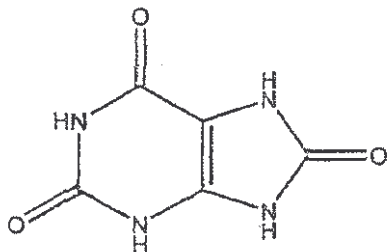
un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo, en los que los restos pueden estar además sustituidos como se ha descrito antes.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina
5 comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula IV



en la que x, x₁, y, t, t₁, y z son enlaces sencillos; en la que x₂ es un doble enlace; en la que t', w', x', y', z', x'' e y'' son 1; en la que R₂, R₄ y R₆, independientemente entre sí, son restos unidos por un doble enlace, que comprenden
10 oxígeno, azufre, CR₈R₉, SO₂ o NR₁₀; y en la que R₁, R₃, R₅ y R₇, independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o
15 un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclico, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo, en los que los restos pueden estar además sustituidos como se ha descrito antes.

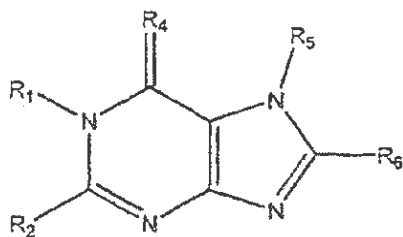
En una realización particular del compuesto de fórmula IV, el derivado de purina comprende ácido úrico, una purina diona que tiene la estructura química



20

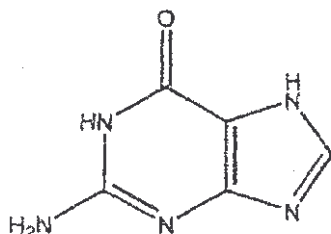
en la que R₁, R₃, R₅ y R₇ son hidrógeno; y R₂, R₄ y R₆ son oxígeno.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula V



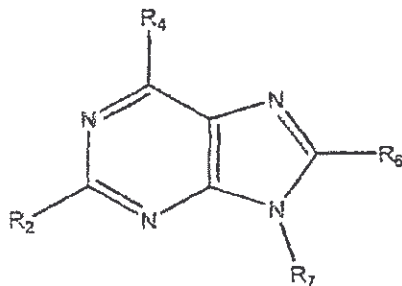
- en la que x, x₁, t₁ y z son enlaces sencillos; en la que x₂, t e y son dobles enlaces; en la que w', x', z', x'' e y'' son 1; en la que y' y t' son 0; en la que R₄ es un resto unido por un doble enlace, que comprende oxígeno, azufre, CR₈R₉, SO₂ o NR₁₀;
- 5 y en la que R₁, R₂, R₅ y R₆, independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal,
- 10 ramificada o cíclico, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo, en los que los restos pueden estar además sustituidos como se ha descrito antes.

En una realización particular del compuesto de fórmula V, el derivado de purina comprende guanina, que tiene la estructura química



- 15 en la que R₁, R₅ y R₆ son hidrógeno; y en la que R₂ es amino; y en la que R₄ es oxígeno.

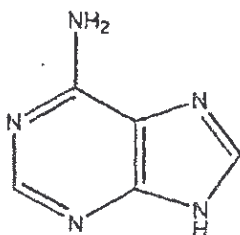
En otra realización, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula VI



- 20 en la que x, x₂, y, y z son dobles enlaces; en la que x₁, t y t₁ son enlaces sencillos; en la que t', w', x'' e y'' son 1; en la que x', y', y z' son 0; y en la que R₂, R₄, R₆ y R₇ comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino,

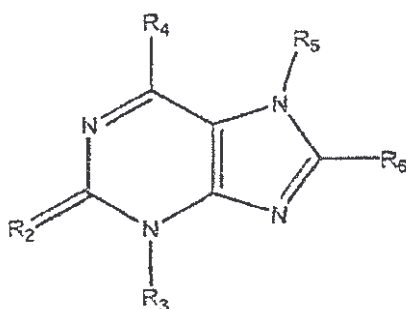
alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo, en los que los restos pueden estar además sustituidos como se ha descrito antes.

En una realización particular del compuesto de fórmula VI, el derivado de purina comprende adenina, que tiene la estructura química



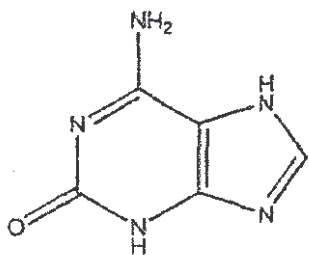
en la que R_2 , R_6 y R_7 son hidrógeno; y en la que R_4 es un amino.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula VII



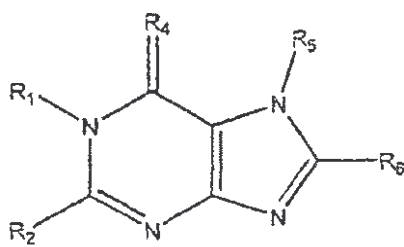
en la que x , x_2 , y t son dobles enlaces; en la que t_1 , x_1 , y , y z son enlaces sencillos; en la que w' , y' , z' , x'' e y'' son 1; en la que t' y x' son 0; en la que R_4 es un resto unido por un doble enlace, que comprende oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ; y en la que R_3 , R_4 , R_5 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo, en los que los restos pueden estar además sustituidos como se ha descrito antes.

En una realización particular del compuesto de fórmula VII, el derivado de purina comprende guanina, que tiene la estructura química



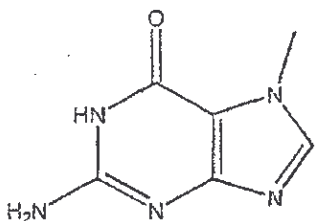
en la que R_3 , R_5 y R_6 son hidrógeno; en la que R_2 es oxígeno; y en la que R_4 es amino.

En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina
5 comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula VIII



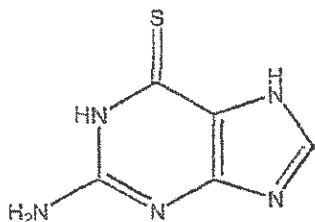
en la que x_2 , y , y t son dobles enlaces; en la que x , x_1 , t_1 y z son enlaces sencillos; en la que w' , x' , z' , x'' e y'' son 1; en la que t' e y' son 0; en la que R_4 es un resto unido por un doble enlace, que comprende oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ; y en la que R_1 , R_2 , R_5 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un grupo
10 hidrógeno, hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal,
15 ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo, en los que los restos pueden estar además sustituidos como se ha descrito antes.

En una realización particular del compuesto de fórmula VIII, el derivado de purina comprende 7-metilguanina, que tiene la estructura química



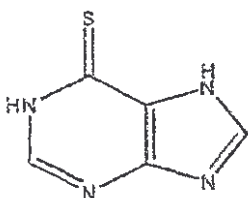
20 en la que R_1 y R_6 son hidrógeno; en la que R_2 es amino; y en la que R_4 es oxígeno; y en la que R_5 es metilo.

En otra realización particular del compuesto de fórmula VIII, el derivado de purina comprende tioguanina, que tiene la estructura química



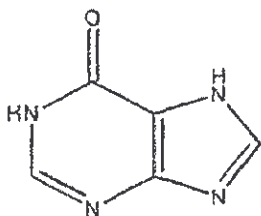
5 en la que R_1 , R_5 y R_6 son hidrógeno; en la que R_2 es amino; y en la que R_4 es azufre.

En otra realización más del compuesto de fórmula VIII, el derivado de purina comprende 6-mecaptopurina, que tiene la estructura química



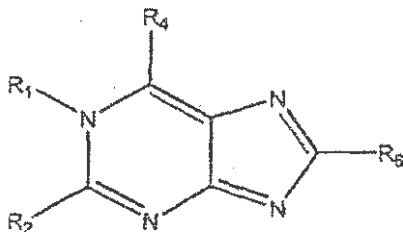
10 en la que R_1 , R_2 , R_5 y R_6 son hidrógeno; y en la que R_4 es azufre.

En otra realización más del compuesto de fórmula VIII, el derivado de purina comprende hipoxantina, que tiene la estructura química



en la que R_1 , R_2 , R_5 y R_6 son hidrógeno; y en la que R_4 es oxígeno.

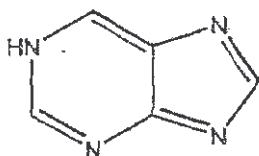
15 En otra realización del compuesto de fórmula I, el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula IX



en la que x_1 , y , t_1 y z son dobles enlaces; en la que x , x_2 y t son enlaces sencillos; en la que w' , x' , x'' e y'' son 1; en la que t' , y' , y z' son 0; en la que R_1 , R_2 , R_4 y R_6 independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino,

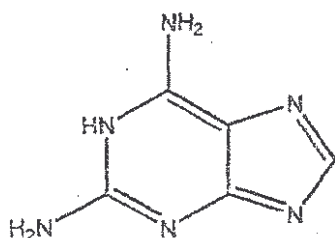
- amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica,
- 5 alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo, en los que los restos pueden estar además sustituidos como se ha descrito antes.

En una realización particular del compuesto de fórmula IX, el derivado de purina comprende 1*H*-purina, que tiene la estructura química



- 10 en la que R_1 , R_2 , R_4 y R_6 son hidrógeno.

En otra realización particular del compuesto de fórmula IX, el derivado de purina comprende diaminopurina, que tiene la estructura química



en la que R_1 y R_6 son hidrógeno; y en la que R_2 y R_4 son amino.

- 15 El término "alquilo", como se usa en esta memoria, salvo que se especifique lo contrario, se refiere a un hidrocarburo saturado, primario, secundario o terciario, lineal, ramificado o cíclico, de C1 a C20, e incluye específicamente metilo, etilo, propilo, isopropilo, butilo, isobutilo, t-butilo, pentilo, isopentilo, neopentilo, hexilo e isohexilo. El término incluye grupos alquilo tanto sustituidos como no sustituidos. Los restos con los
- 20 que puede estar sustituido el grupo alquilo se seleccionan del grupo que consiste en hidrógeno, halógeno, hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, y cualquier otro
- 25 grupo funcional viable.

El término "alquenilo", como se hace referencia en esta memoria, y salvo que se especifique lo contrario, se refiere a un hidrocarburo lineal, ramificado o cíclico de C2 a C10, con al menos un doble enlace. Los grupos alquenilo pueden estar

opcionalmente sustituidos de la misma forma que se ha descrito antes para el grupo alquilo y también pueden estar opcionalmente sustituidos con un grupo alquilo sustituido o no sustituido.

El término “alquinilo”, como se usa en esta memoria, y salvo que se especifique lo contrario, se refiere a un hidrocarburo lineal o ramificado de C2 a C10, con al menos un triple enlace. Los grupos alquinilo pueden estar opcionalmente sustituidos de la misma forma que se ha descrito antes para los grupos alquilo y también pueden estar opcionalmente sustituidos con un grupo alquilo sustituido o no sustituido.

El término “arilo”, como se usa en esta memoria, y salvo que se especifique lo contrario, se refiere a cualquier grupo funcional o sustituyente derivado de un anillo aromático. Los ejemplos no limitantes incluyen fenilo, bifenilo o naftilo. El término incluye tanto restos sustituidos como no sustituidos. El grupo arilo puede estar opcionalmente sustituido con uno o más restos como se ha descrito antes para los grupos alquilo o un grupo alquilo sustituido o no sustituido.

El término “heteroarilo” o “heteroaromático”, como se usa en esta memoria, se refiere a un resto cíclico aromático o insaturado que incluye al menos un azufre, oxígeno, nitrógeno o fósforo en el anillo aromático. Los ejemplos no limitantes son furilo, piridilo, pirimidilo, tienilo, isotiazolilo, imidazolilo, tetrazolilo, pirazinilo, benzofuranilo, benzotiofenilo, quinolilo, isoquinolilo, benzotienilo, isobenzofurilo, pirazolilo, indolilo, isoindolilo, bencimidazolilo, purinilo, carbazolilo, oxazolilo, tiazolilo, isotiazolilo, 1,2,4-tiadiazolilo, isoxazolilo, pirrolilo, quinazolinilo, piridazinilo, pirazinilo, cinolilo, ftalazinilo, quinoxalinilo, xantinilo, hipoxantinilo y pteridinilo. El grupo heteroarilo o heteroaromático puede estar opcionalmente sustituido con uno o más restos como se ha descrito antes para el grupo alquilo o un grupo alquilo sustituido o no sustituido.

El término “heterocíclico” se refiere a un grupo cíclico no aromático saturado que puede estar opcionalmente sustituido, y en el que hay al menos un heteroátomo o átomo no carbono, tal como oxígeno, azufre, nitrógeno o fósforo en el anillo. El grupo heterocíclico puede estar opcionalmente sustituido de la misma forma que se ha descrito antes para el grupo heteroarilo.

El término “aralquilo”, como se usa en esta memoria, y salvo que se especifique lo contrario, se refiere a un grupo arilo como se ha definido antes unido a la molécula por un grupo alquilo como se ha definido antes. El término alcarilo, como se usa en esta memoria, y salvo que se especifique lo contrario, se refiere a un grupo alquilo como se ha definido antes, unido a la molécula por un grupo arilo como se ha

definido antes. El grupo aralquilo o alcarilo puede estar opcionalmente sustituido con uno o más restos seleccionados del grupo que consiste en hidroxilo, carboxi, carboxamido, carboalcoxi, acilo, amino, halógeno, alquilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, ciano, sulfo, sulfato, fosfo, fosfato y fosfonato.

5 El término “halógeno”, como se usa en esta memoria, incluye específicamente cloro, bromo, yodo y flúor.

El término “alcoxi”, como se usa en esta memoria, y salvo que se especifique lo contrario, se refiere a un resto de estructura –O-alquilo, en el que el alquilo es como se ha definido antes.

10 El término “acilo”, como se usa en esta memoria, se refiere a un grupo de fórmula $C(O)R'$, en el que R' es un grupo alquilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico, alcarilo o aralquilo, o alquilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico, aralquilo o alcarilo sustituidos, en los que estos grupos son como se han definido antes.

II. Métodos para hacer la composición de poliéster y los envases

15 Como se ha descrito antes, la composición de poliéster de esta invención es útil para hacer envases en los que se desea una barrera a los gases potenciada. En resumen, dichos envases están hechos conformando las composiciones de poliéster descritas antes en el envase deseado por métodos convencionales tales como el conformado en estado fundido. Los procedimientos de conformado en estado fundido
20 adecuados incluyen, pero sin limitar, moldeo por inyección, extrusión, conformado térmico y moldeo por compresión. El método particularmente preferido para hacer los envases de esta invención es el moldeo por estirado-soplado.

También se proporcionan en esta memoria métodos para incorporar el aditivo derivado de purina en el envase y la composición de poliéster. Dichos métodos
25 también son conocidos para los expertos en la técnica. Por ejemplo, un aditivo se puede alimentar directamente en el poliéster durante el procedimiento de moldeo por inyección, premezclado con la resina de poliéster antes del moldeo por inyección, o incorporarlo en concentraciones altas con el PET como mezcla madre y después mezclarlo con la resina de poliéster antes del moldeo por inyección del envase.

30 La figura 1 ilustra un sistema **10** de acuerdo con una realización de esta invención, para hacer una preforma de envase rígida **12** (ilustrada en la figura 2) y un envase rígido **14** (ilustrado en la figura 3) a partir de la preforma. Como se muestra en la figura 1, se añaden PET **20** y un aditivo potenciador de la barrera a los gases **22**, tal como un derivado de purina, a un alimentador o tolva **24** que suministra los
35 componentes a una extrusora de fundido caliente **26** en la que los componentes se

funden y mezclan. La extrusora de fundido en caliente **26** después extruye la mezcla fundida de PET **20** y aditivo potenciador de la barrera a los gases **22** en un dispositivo de moldeo por inyección **28** para formar la preforma **12**. La preforma **12** se enfría y se retira del dispositivo de moldeo por inyección **28** y se suministra a un dispositivo de moldeo por estirado-soplado **30** que moldea por estirado-soplado la preforma **12** en un envase rígido acabado **14**.

El tiempo de permanencia del fundido de la producción de la preforma es preferiblemente menos de 5 minutos y más preferiblemente de aproximadamente 1 a aproximadamente 3 minutos. Las temperaturas del fundido son convenientemente de aproximadamente 270 a aproximadamente 300°C y más convenientemente de aproximadamente 270 a aproximadamente 290°C. El tiempo de permanencia del fundido empieza cuando el PET **20** y aditivo potenciador de la barrera a los gases **22** entran en la extrusora de fundido **26** y empieza la fusión, y termina después de inyectar la masa fundida en el molde de inyección para formar la preforma **12**.

En una realización particular, el procedimiento de moldeo por inyección se puede modificar presurizando la cavidad del molde para minimizar el depositado, como se describe en la solicitud de patente de EE.UU. en tramitación con la presente, titulada "Pressurized Tooling for Injection Molding and Method of Using", que se incorpora en esta memoria por referencia en su totalidad, y se presentó el 15 de septiembre de 2006, por Schultheis et al. La presurización de la cavidad del molde cambia la dinámica del ciclo de procesamiento reduciendo o eliminando completamente la capacidad de los aditivos para difundirse por el copolímero de PET y depositarse en la superficie interior del molde. La presión deseada de la cavidad del molde se puede optimizar para un material polímero, matriz polímera o aditivo particulares.

El procedimiento de moldeo por inyección modificado (no representado) incluye la etapa adicional de presurizar un molde introduciendo un gas presurizado en una cavidad del molde en el molde, en el que la cavidad del molde define la forma de la preforma del envase; introducir una composición de poliéster en la cavidad del molde; enfriar la composición de poliéster para formar la preforma del envase; y retirar la preforma del envase de la cavidad del molde.

El gas presurizado puede ser cualquier gas que no afecte de forma perjudicial a la composición de poliéster. Los ejemplos no limitantes incluyen aire y sus componentes individuales, oxígeno, nitrógeno y dióxido de carbono; gases nobles,

argón, neón, helio y xenón; y mezclas de los mismos. En una realización particular, la cavidad del molde está presurizada a una presión en el intervalo de 0,07 a 70 kg/cm².

III. Envases

5 Como conocen bien los expertos en la técnica, los envases se pueden hacer por moldeo por soplado de una preforma de envase. Los ejemplos de estructuras de preforma y envase adecuadas se describen en la patente de EE.UU. 5.888.598, cuya descripción se incorpora expresamente en el presente documento por referencia en su totalidad.

10 En la figura 2 se ilustra una preforma de envase de poliéster **12**. La preforma **12** se hace por moldeo por inyección de resina basada en PET y comprende un acabado de cuello roscado **112**, que termina en su extremo inferior en un reborde de terminación **114**. Debajo del reborde de terminación **114**, hay una sección generalmente cilíndrica **116** que termina en una sección **118** de diámetro exterior que crece de forma gradual, para sí proporcionar un grosor de la pared creciente. Debajo
15 de la sección **118** hay una sección del cuerpo alargada **120**.

La preforma **12** ilustrada en la figura 2 se puede moldear por estirado-soplado para formar un envase **14** ilustrado en las figuras 3 y 4. El envase **14** comprende una carcasa **124** que comprende una terminación de cuello roscado **126** que define una boca **128**, un reborde de terminación **130** debajo del acabado de cuello roscado, una
20 sección cónica **132** que se extiende desde el reborde de terminación, una sección de cuerpo **134** que se extiende debajo de la sección cónica, y una base **136** en la parte inferior del envase. El envase **14** se usa adecuadamente para hacer una bebida envasada **138**, como se ilustra en la figura 4. La bebida envasada **138** incluye una bebida tal como un refresco carbonatado dispuesto en el envase **14** y un cierre **140**
25 que cierra la boca **128** del envase.

El envase de poliéster comprende opcionalmente una pluralidad de capas como se describe en la solicitud de patente en tramitación con la presente número 60/825.861, presentada el 15 de septiembre, 2006, titulada "Multilayer Container having Small Molecule Barrier Additives", cuya descripción se incorpora expresamente
30 en esta memoria por referencia en su totalidad. Un envase de multicapas puede permitir el uso de aditivos en una capa de barrera que normalmente sería demasiado volátil para incluir en un envase de una sola capa porque el aditivo de bajo peso molecular está contenido dentro de dos capas exteriores sin el aditivo de bajo peso molecular, previniendo el contacto entre el aditivo de bajo peso molecular y las
35 superficies del aparato de moldeo por inyección.

Descrito brevemente, un envase de multicapas comprende al menos dos capas exteriores que comprenden una matriz polímera y al menos una capa de barrera dispuesta entre las al menos dos capas exteriores. La al menos una capa de barrera comprende una composición de poliéster que comprende un poliéster y un aditivo de barrera a los gases potenciada que comprende un derivado de purina. De forma conveniente, el aditivo de bajo peso molecular está presente en el envase de multicapas en una cantidad en el intervalo de aproximadamente 0,2 a aproximadamente 10 por ciento en peso del envase, las al menos dos capas exteriores comprenden de aproximadamente 99 a aproximadamente 20 por ciento en peso del envase, y la una o más capas de barrera comprenden de aproximadamente 1 a aproximadamente 80 por ciento en peso del envase. En otra realización particular, el envase de multicapas comprende además al menos una capa intermedia entre la al menos una capa de barrera y las al menos dos capas exteriores.

La preforma **12**, el envase **14** y la bebida envasada **138** son solo ejemplos de aplicaciones usando las preformas de la presente invención. Debe entenderse que el procedimiento y el aparato de la presente invención se pueden usar para hacer preformas y envases que tienen una variedad de configuraciones.

La presente invención se ilustra más con los siguientes ejemplos, que no deben considerarse de ninguna forma como limitaciones impuestas en el alcance de la misma. Por el contrario, debe entenderse claramente que se puede recurrir a otras realizaciones, modificaciones y equivalentes de la misma que, la lectura de la descripción de la misma pueda sugerir al experto en la técnica, sin salirse del espíritu de la presente invención y/o el alcance de las reivindicaciones adjuntas.

Ejemplos

Ejemplo 1

Una resina de poliéster de calidad para envases disponible en el comercio (Kosa, Spartanburg, Carolina del Sur) se secó en un horno a vacío a 140°C durante la noche hasta un nivel de humedad inferior a 50 ppm. Los aditivos se secaron en un horno a vacío a 70°C durante la noche para eliminar la humedad de la superficie. Los envases se fabricaron con el PET, tanto solo como combinado con cantidades variables de aditivos. Se usó una máquina de moldeo por inyección de una cavidad Arburg para escala de laboratorio, para el moldeo por inyección. Las preformas se moldearon por sopado con una máquina de moldeo por soplado Sidel SBO 2/3 para hacer envases de contorno aceptable. Una preforma de 24,5 g hacía un envase de 500 ml.

Después se midieron las velocidades de transmisión de oxígeno de los envases usando un instrumento modelo Mocon 2/60 a 22,2°C y una humedad relativa (HR) de 50% con velocidades de purgado de N₂/H₂ (99:1) y aire de 10 ml/min en lados opuestos. Los resultados se muestran en la tabla 1. El factor de mejoramiento de la barrera (BIF) se definió como la relación de la velocidad de transmisión de oxígeno del envase de poliéster con aditivo con respecto a la velocidad de transmisión de oxígeno del envase de poliéster sin aditivo.

Tabla 1. Velocidad de transmisión de oxígeno de envases de PET de 500 ml.

Aditivo	Porcentaje en peso	VI (dl/g)	Velocidad de transmisión de O ₂ (ml/envase/día)	BIF para oxígeno	Aspecto de la botella
S/A	0	0,80	0,046	1,00	Transparente
Cafeína	3	0,79	0,0306	1,5	Transparente
Cafeína	5	0,77	0,0261	1,76	Transparente

El BIF para el oxígeno de los envases de 500 ml mejoró significativamente con la adición de cafeína a la composición de PET, sin perjudicar la VI o transparencia de los envases.

Ejemplo 2

Una resina de poliéster de calidad para envases disponible en el comercio (Vordian, Kingsport, Tennessee), se preparó, se moldeó por inyección y se moldeó por soplado como se ha descrito en el ejemplo 1. Una preforma de 26,5 g hizo un envase de 591,5 ml.

Las botellas se llenaron con hielo seco para lograr una presión interior de 3,92 kg/cm². Se midió la velocidad de pérdida de CO₂ de las botellas a 22°C y 50% de HR usando un método descrito en la patente de EE.UU. n° 5.473.161, que se incorpora en esta memoria por referencia en su totalidad. Los resultados se muestran en la tabla 2. El factor de mejoramiento de la barrera (BIF) se definió como la relación de la velocidad de pérdida de CO₂ del envase de poliéster sin aditivo dividido entre la velocidad de pérdida de CO₂ del envase de poliéster con aditivo. También se calculó la vida en anaquel del refresco carbonatado simulado, para cada envase, como se describe en la patente de EE.UU. número 5.473.161.

Tabla 2. Pérdida de CO₂ de envases de PET de 591,5 ml

Aditivo	Porcentaje en peso	Vida en anaquel para CO ₂ (semanas)	BIF para CO ₂
S/A	0	8,7	1,00
Cafeína	0,2	9,2	1,1
Cafeína	7,7	14,6	1,7
Cafeína	10	17,77	2,0

El BIF para el dióxido de carbono de envases de poliéster de 591,5 ml mejoró significativamente con la adición de cafeína a la composición de PET, aumentando significativamente la vida en anaquel respecto al dióxido de carbono de los envases de poliéster.

Ejemplo 3

Una resina de poliéster de calidad para envases disponible en el comercio (Kosa, Spartanburg, Carolina del Sur), se preparó, se moldeó por inyección y se moldeó por soplado como se ha descrito en el ejemplo 1. Una preforma de 21 g hizo un envase de 355 ml. La velocidad de pérdida de CO₂ de las botellas y la vida en anaquel respecto al CO₂ se determinaron como se describe en el ejemplo 2. Los resultados se muestran en la tabla 3

Tabla 3. Pérdida de CO₂ de envases de PET de 355 ml

Aditivo	Porcentaje en peso	VI (dl/g)	Vida en anaquel para CO ₂ (semanas)	BIF para CO ₂
S/A	0	0,77	8,9	1,0
Cafeína	1	0,77	10,4	1,2
Cafeína	3	0,75	12,2	1,4
Cafeína	5	0,77	13,8	1,6

El BIF para el dióxido de carbono de los envases de 355 ml mejoró significativamente con la adición de cafeína a la composición de PET, aumentando significativamente la vida en anaquel respecto al dióxido de carbono de los envases sin deteriorar la VI de los envases.

Ejemplo 4

Una resina de poliéster de calidad para envases disponible en el comercio (Kosa, Spartanburg, Carolina del Sur), se combinó con cafeína (12 por ciento en peso), se formaron pelets y se secaron a 140°C. Se combinaron la mezcla y PET seco

preparado como se describe en el ejemplo 1, para conseguir un nivel de carga de cafeína de 3 por ciento en peso antes del moldeo por inyección, como se describe en el ejemplo 1, con una temperatura del molde ajustada a 38°C para hacer preformas de 21 g aceptables. Las preformas se recogieron en diferentes tiempos durante el desarrollo del moldeo por inyección y se cortaron por la mitad de forma que se podían medir los colores de las preformas con un colorímetro de laboratorio Hunter. Los resultados se muestran en la tabla 4. El tiempo 0 representa la preforma de PET sin cafeína. El espacio de color L*, a*, b* del Hunter es un espacio de color rectangular tridimensional basado en la teoría de colores opuestos y extendido en la región del amarillo, en el que en el eje L* (claridad) el blanco es 100 y el negro es 0, en el que en el eje a* (rojo-verde) el rojo es positivo, el verde es negativo, y neutro es 0; y en el que en el eje b* (azul-amarillo) el amarillo es positivo, el azul es negativo, y neutro es 0. DE* es una medida de la diferencia de color total, calculada tomando la raíz cuadrada de la suma de los cuadrados de los cambios en L*, a*, b*.

Tabla 4. Color de la preforma de PET en función del tiempo de experimento (h)

Tiempo (h)	L*	a*	b*	Turbidez	DE*
0	79,38	-0,32	2,16	15,84	19,99
0,5	78,66	-0,66	3,38	11,71	20,43
1,5	78,76	-0,64	3,57	11,26	20,36
2,5	78,70	-0,65	3,47	11,27	20,40
3,5	78,55	-0,61	3,5	11,65	20,56
4,5	78,68	-0,60	3,32	11,69	20,40
5,5	78,70	-0,61	3,40	11,97	20,39
6,5	78,70	-0,59	3,33	11,96	20,39
7,5	78,89	-0,63	3,64	12,30	20,24
8,5	78,95	-0,61	3,26	12,01	20,12
9,5	78,96	-0,62	3,42	11,98	20,14
10,5	78,81	-0,62	3,31	12,47	20,27

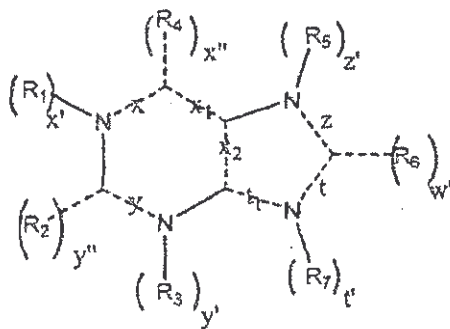
No hay una diferencia significativa entre los colores de las preformas en diferentes tiempos del experimento, indicando que la adición de cafeína a la composición de PET no deteriora significativamente las cualidades de la preforma en diferentes tiempos.

Debe ser evidente que lo anterior se refiere solo a las realizaciones preferidas de la presente invención y que se pueden hacer numerosos cambios y modificaciones

en esta memoria sin salirse del espíritu y alcance de la invención como se define en las siguientes reivindicaciones y equivalentes de las mismas.

REIVINDICACIONES

1. Un envase que comprende una composición de poliéster, que comprende un poliéster y un derivado de purina, en el que el derivado de purina comprende un compuesto que tiene la estructura química de la fórmula I



- en la que R_1 , R_3 , R_5 , y R_7 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo arilamino, alcoxi, ariloxi, alquenilo, alquinilo, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo;

en la que t , t_1 , x , x_1 , x_2 , y , y z , independientemente entre sí, son un enlace sencillo o un doble enlace; en la que t' , x' , y' , y z' , independientemente entre sí, son 0 ó 1; en la que x'' , y'' y w' , independientemente entre sí, son 1 ó 2;

- en la que cuando x es un doble enlace, x_1 es un enlace sencillo; en la que cuando x_1 es un doble enlace, x y x_2 son enlaces sencillos; en la que cuando x_2 es un doble enlace, x_1 y t_1 son enlaces sencillos; en la que cuando t es un doble enlace, t_1 y z son enlaces sencillos; en la que cuando z es un doble enlace, t es un enlace sencillo; en la que cuando t_1 es un doble enlace, t y x_2 son enlaces sencillos; en la que cuando x es un doble enlace, x' es 0; en la que cuando x o x_1 es un doble enlace, x'' es 1; en la que cuando y es un doble enlace, y' es 0 y y'' es 1; en la que cuando t o t_1 es un doble enlace, t' es 0; en la que cuando z y t son enlaces sencillos, w' es 2; en la que cuando z o t es un doble enlace, w' es 1; en la que cuando z es un doble enlace, z' es 0; en la que cuando x , y o z , independientemente entre sí, es un enlace sencillo, x' , y' o z' independientemente entre sí, es 1;

- en la que R_2 , R_4 y R_6 , independientemente entre sí, pueden ser restos unidos por un enlace sencillo o doble;

en la que cuando R_2 , R_4 o R_6 es un resto unido por un enlace sencillo, R_2 , R_4 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano,

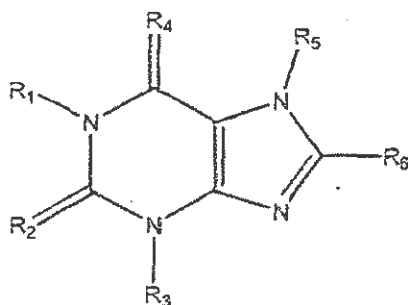
sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazina, carbamilo, ácido fosfórico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo;

- 5 en la que cuando R_2 , R_4 o R_6 es un resto unido por un doble enlace, R_2 , R_4 o R_6 , independientemente entre sí, comprende oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 , o NR_{10} ; R_8 y R_9 , independientemente entre sí comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, suifinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo; y R_{10} comprende un hidrógeno, arilamino, alcoxi, ariloxi, alquenilo, alquinilo, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.
- 10
- 15 En la que cuando x'' es 2, ambos restos R_2 pueden ser iguales o diferentes; en la que cuando y'' es 2, ambos restos R_4 pueden ser iguales o diferentes; y en la que cuando w' es 2, ambos restos R_6 pueden ser iguales o diferentes.

2. El envase de la reivindicación 1, en el que

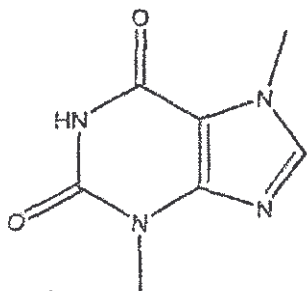
- 20 a) el poliéster está presente en la composición de poliéster en una cantidad en el intervalo de aproximadamente 95 a aproximadamente 99 por ciento en peso de la composición de poliéster; y
- b) el derivado de purina está presente en la composición de poliéster en una cantidad en el intervalo de aproximadamente 0,2 a aproximadamente 10 por ciento en
- 25 peso de la composición de poliéster.

3. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina de fórmula I comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula II



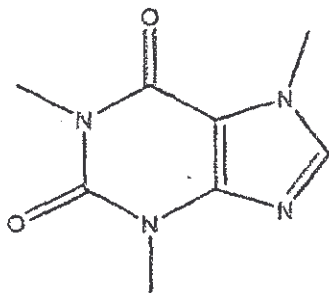
- en la que x , x_1 , y , y z son enlaces sencillos; en la que x_2 y t son dobles enlaces; en la que w' , x' , y' , z' , x'' , e y'' son 1; en la que t' es 0; en la que R_2 y R_4 , independientemente entre sí, son restos unidos por un doble enlace, que comprenden oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ; y en la que R_1 , R_3 , R_5 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

4. El envase de la reivindicación 3, en el que el derivado de purina de fórmula II comprende teobromina, una purina diona que tiene la estructura química



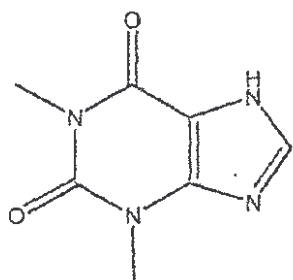
- en la que R_1 y R_6 son hidrógeno; en la que R_2 y R_4 son oxígeno; y en la que R_3 y R_5 son metilo.

5. El envase de la reivindicación 3, en el que el derivado de purina de fórmula II comprende cafeína, una purina diona que tiene la estructura química



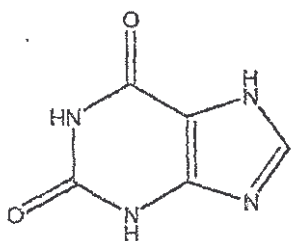
en la que R_6 es hidrógeno; R_2 y R_4 son oxígeno; y R_1 , R_3 y R_5 son metilo.

6. El envase de la reivindicación 3, en el que el derivado de purina de fórmula II comprende teofilina, una purina diona que tiene la estructura química



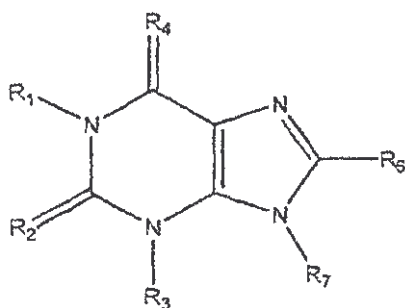
en la que R_5 y R_6 son hidrógeno; en la que R_2 y R_4 son oxígeno; y en la que R_1 y R_3 son metilo.

- 5 7. El envase de la reivindicación 3, en el que el derivado de purina de fórmula II comprende xantina, una purina diona que tiene la estructura química



en la que R_1 , R_3 , R_5 y R_6 son hidrógeno; y R_2 y R_4 son oxígeno.

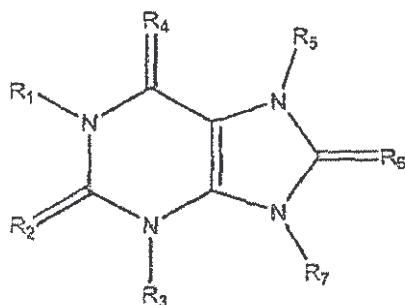
- 10 8. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina de fórmula I comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula III



- en la que x , x_1 , y , y t y t_1 son enlaces sencillos; en la que x_2 y z son dobles enlaces; en la que t' , w' , x' , x'' e y'' son 1; en la que z' es 0; en la que R_2 y R_4 ,
 15 independientemente entre sí, son restos unidos por un doble enlace, que comprenden oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ; y en la que R_1 , R_3 , R_6 y R_7 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino,
 20 tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o

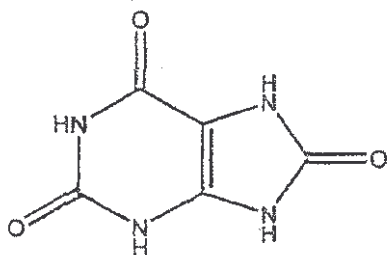
un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

9. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina de fórmula I
5 comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula IV



- en la que x, x₁, y, t, t₁, y z son enlaces sencillos; en la que x₂ es un doble enlace; en la que t', w', x', y', z', x'' e y'' son 1; en la que R₂, R₄ y R₆, independientemente entre sí, son restos unidos por un doble enlace, que comprenden
10 oxígeno, azufre, CR₈R₉, SO₂ o NR₁₀; y en la que R₁, R₃, R₅ y R₇, independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o
15 un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterociclo o acilo.

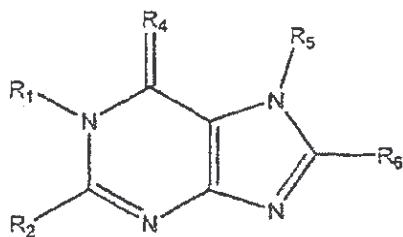
10. El envase de la reivindicación 9, en el que el derivado de purina de fórmula IV comprende ácido úrico, una purina diona que tiene la estructura química



20

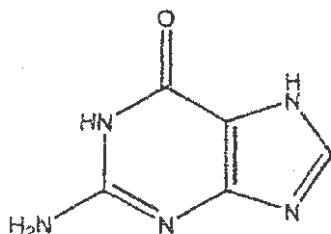
en la que R₁, R₃, R₅ y R₇ son hidrógeno; y R₂, R₄ y R₆ son oxígeno.

11. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina de fórmula I comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula V



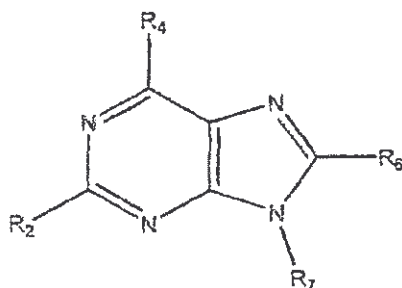
- en la que x, x₁, t₁, y z son enlaces sencillos; en la que x₂, t e y son dobles enlaces; en la que w', x', z', x'' e y'' son 1; en la que y' y t' son 0; en la que R₄ es un resto unido por un doble enlace, que comprende oxígeno, azufre, CR₈R₉, SO₂ o NR₁₀;
- 5 y en la que R₁, R₂, R₅ y R₆, independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal,
- 10 ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

12. El envase de la reivindicación 11, en el que el derivado de purina de fórmula V comprende guanina, que tiene la estructura química



- 15 en la que R₁, R₅ y R₆ son hidrógeno; y en la que R₂ es amino; y en la que R₄ es oxígeno.

13. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina de fórmula I comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula VI

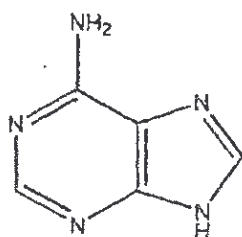


20

en la que x, x₂, y, y z son dobles enlaces; en la que x₁, t y t₁ son enlaces sencillos; en la que t', w', x'' e y'' son 1; en la que x', y', y z' son 0; y en la que R₂, R₄, R₆

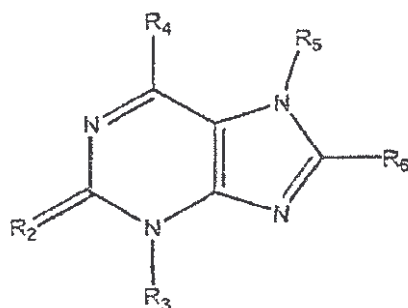
y R_7 comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

14. El envase de la reivindicación 13, en el que el derivado de purina de fórmula VI comprende adenina, que tiene la estructura química



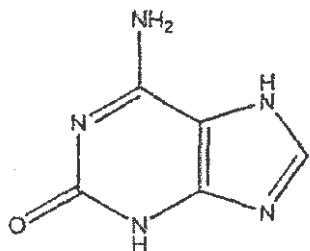
en la que R_2 , R_6 y R_7 son hidrógeno; y en la que R_4 es un amino.

15. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina de fórmula I comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula VII



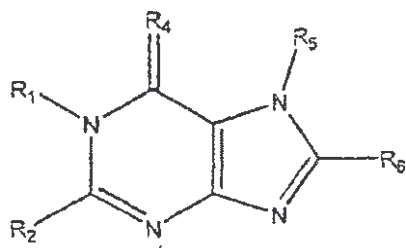
en la que x , x_2 , y t son dobles enlaces; en la que t_1 , x_1 , y , y z son enlaces sencillos; en la que w' , y' , z' , x'' e y'' son 1; en la que t' y x' son 0; en la que R_4 es un resto unido por un doble enlace, que comprende oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ; y en la que R_3 , R_4 , R_5 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

16. El envase de la reivindicación 15, en el que el derivado de purina de fórmula VII comprende guanina, que tiene la estructura química



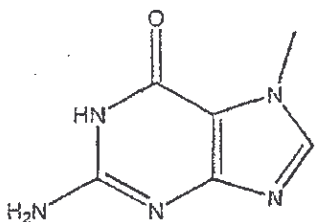
5 en la que R_3 , R_5 y R_6 son hidrógeno; en la que R_2 es oxígeno; y en la que R_4 es amino.

17. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina de fórmula I comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula VIII



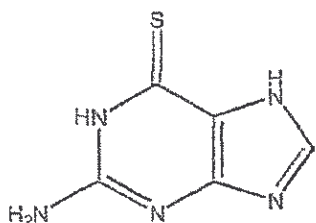
10 en la que x_2 , y , y t son dobles enlaces; en la que x , x_1 , t_1 y z son enlaces sencillos; en la que w' , x' , z' , x'' e y'' son 1; en la que t' e y' son 0; en la que R_4 es un resto unido por un doble enlace, que comprende oxígeno, azufre, CR_8R_9 , SO_2 o NR_{10} ; y en la que R_1 , R_2 , R_5 y R_6 , independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

20 18. El envase de la reivindicación 17, en el que el derivado de purina de fórmula VIII comprende 7-metilguanina, que tiene la estructura química



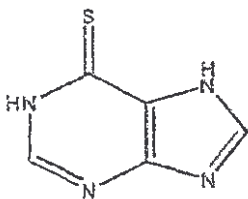
en la que R_1 y R_6 son hidrógeno; en la que R_2 es amino; y en la que R_4 es oxígeno; y en la que R_5 es metilo.

19. El envase de la reivindicación 17, en el que el derivado de purina de fórmula VIII comprende tioguanina, que tiene la estructura química



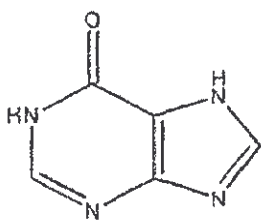
en la que R_1 , R_5 y R_6 son hidrógeno; en la que R_2 es amino; y en la que R_4 es azufre.

20. El envase de la reivindicación 17, en el que el derivado de purina de fórmula VIII comprende 6-mecaptopurina, que tiene la estructura química



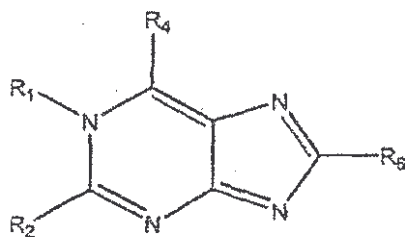
en la que R_1 , R_2 , R_5 y R_6 son hidrógeno; y en la que R_4 es azufre.

21. El envase de la reivindicación 17, en el que el derivado de purina de fórmula VIII comprende hipoxantina, que tiene la estructura química



en la que R_1 , R_2 , R_5 y R_6 son hidrógeno; y en la que R_4 es oxígeno.

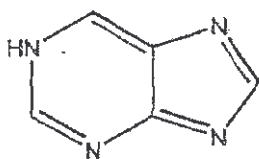
22. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina de fórmula I comprende un compuesto que tiene la estructura química de fórmula IX



5 en la que x_1 , y , t_1 y z son dobles enlaces; en la que x , x_2 y t son enlaces sencillos; en la que w' , x' , x'' e y'' son 1; en la que t' , y' , y z' son 0; en la que R_1 , R_2 , R_4 y R_6 independientemente entre sí, comprenden un hidrógeno, grupo hidroxilo, amino, amido, alquilamino, arilamino, alcoxi, ariloxi, nitro, acilo, alquenilo, alquinilo, ciano, sulfo, sulfato, mercapto, imino, sulfonilo, sulfenilo, sulfinilo, sulfamoilo, fosfonilo, fosfinilo, fosforilo, fosfino, tioéster, tioéter, anhídrido, oximino, hidrazino, carbamilo, ácido fosfónico, fosfonato, o un grupo alquilo de cadena lineal, ramificada o cíclica, alquenilo, alquinilo, arilo, heteroarilo, heterocíclico o acilo.

10

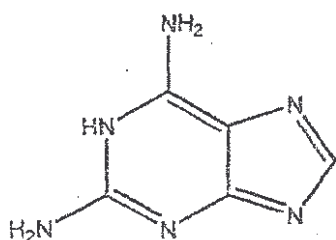
23. El envase de la reivindicación 22, en el que el derivado de purina de fórmula IX comprende 1*H*-purina, que tiene la estructura química



en la que R_1 , R_2 , R_4 y R_6 son hidrógeno.

15

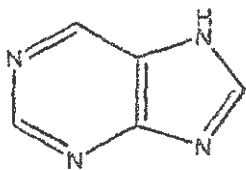
24. El envase de la reivindicación 22, en el que el derivado de purina de fórmula IX comprende diaminopurina, que tiene la estructura química



en la que R_1 y R_6 son hidrógeno; y en la que R_2 y R_4 son amino.

20

25. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina de fórmula I comprende 7*H*-purina, que tiene la estructura química de fórmula



en la que x , x_2 , y , y t son doble enlaces; en la que x_1 , t_1 y z son enlaces sencillos; en la que x' , y' , y t' son 0; en la que x'' , y'' , z'' y w' son 1; y en la que R_2 , R_4 , R_5 , y R_6 son hidrógeno.

5

26. El envase de la reivindicación 1, en el que el poliéster comprende poli(tereftalato de etileno).

27. El envase de la reivindicación 1, en el que el poliéster comprende un
10 copolímero basado en poli(tereftalato de etileno) que tiene menos de 20 por ciento de diácido, 10 por ciento de modificación de glicol, o ambos, basado en 100 por cien en moles del componente diácido y 100 por cien en moles del componente diol.

28. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina está
15 presente en la composición de poliéster en una cantidad en el intervalo de aproximadamente 0,2 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la composición de poliéster.

29. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina está
20 presente en la composición de poliéster en una cantidad en el intervalo de aproximadamente 3 a aproximadamente 10 por ciento en peso de la composición de poliéster.

30. El envase de la reivindicación 1, en el que el derivado de purina está
25 presente en la composición de poliéster en una cantidad en el intervalo de aproximadamente 3 a aproximadamente 5 por ciento en peso de la composición de poliéster.

31. Una bebida envasada que comprende una bebida dispuesta en el envase
30 de una cualquiera de las reivindicaciones 1 a 30, y un cierre para cerrar la bebida en el envase.

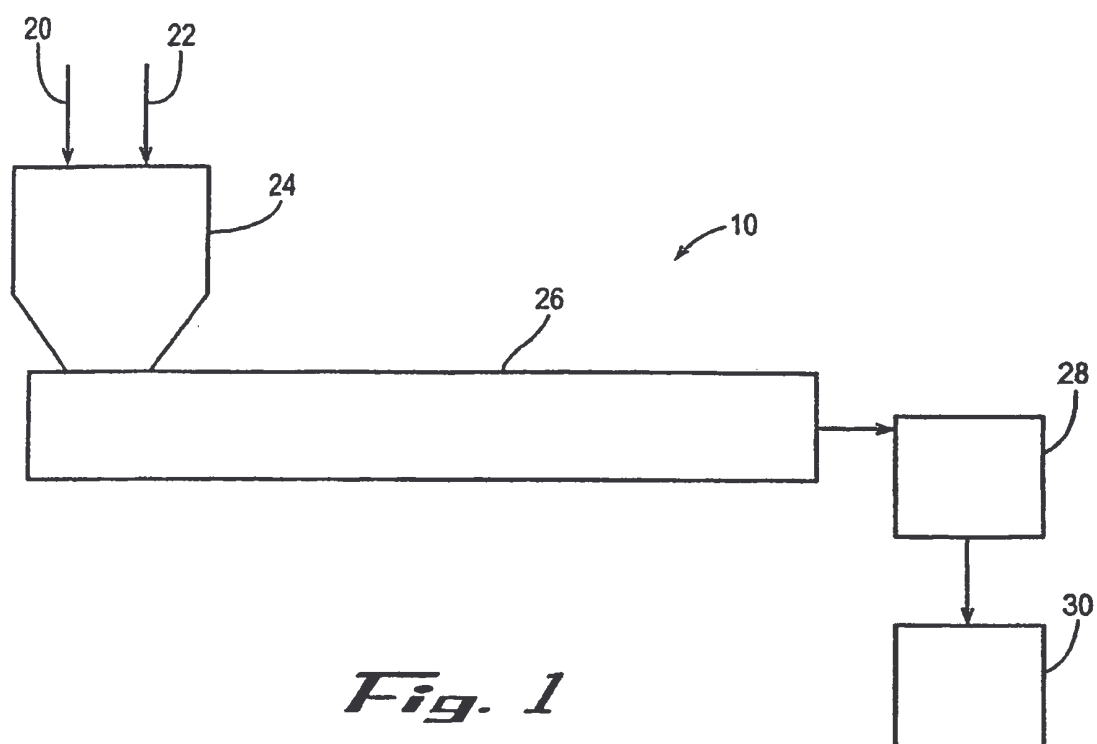


Fig. 1

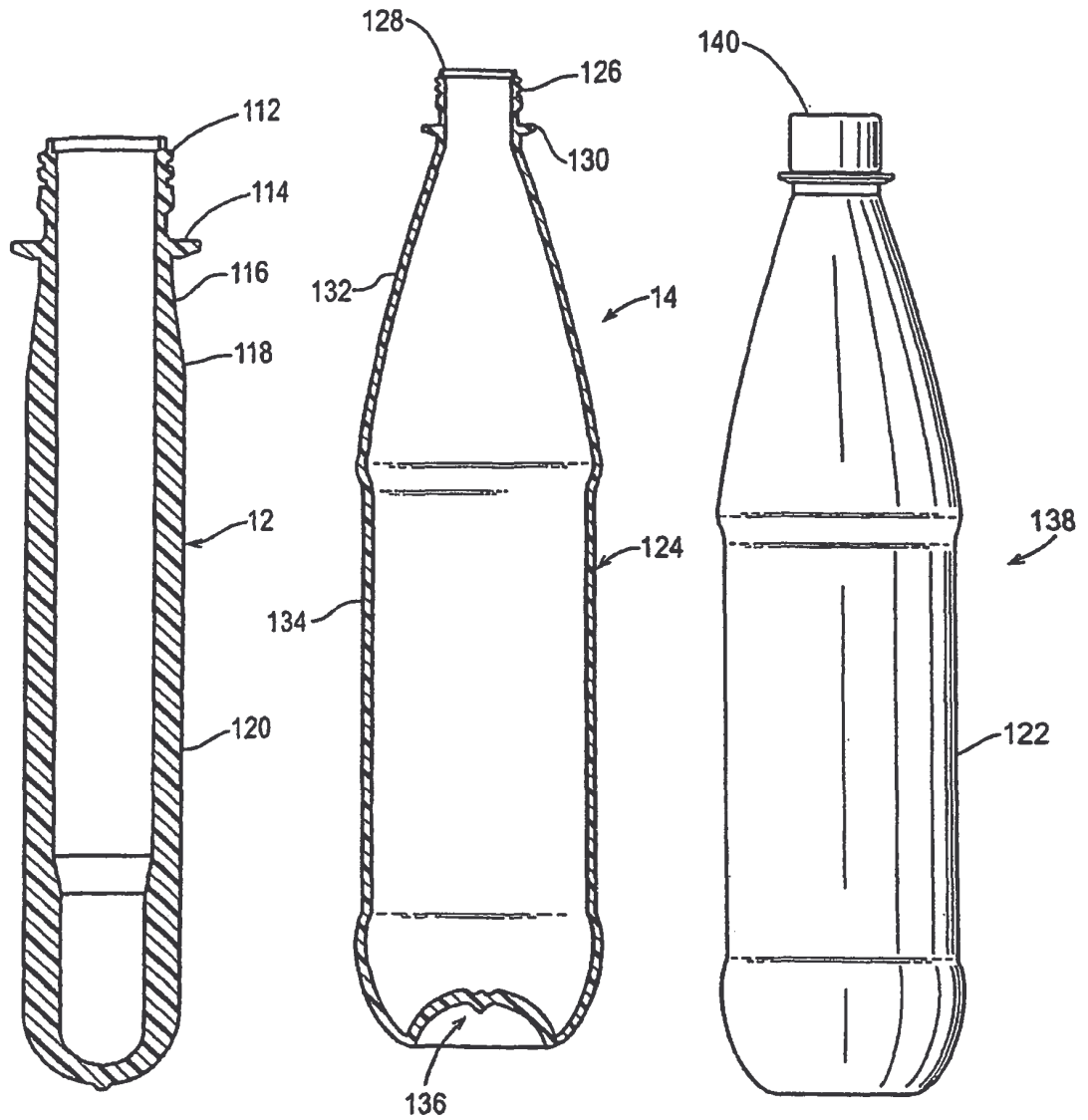


Fig. 2

Fig. 3

Fig. 4