	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2016-0006775 (43) 공개일자 2016년01월19일
<p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  <i>C08G 18/80</i> (2006.01) <i>C08G 18/70</i> (2006.01)  <i>C08G 18/76</i> (2006.01) <i>C08G 18/77</i> (2006.01)  <i>C08G 18/78</i> (2006.01) <i>C08G 18/79</i> (2006.01)  <i>C08J 9/02</i> (2006.01) <i>C08J 9/12</i> (2006.01)  <i>C08G 101/00</i> (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류  <i>C08G 18/80</i> (2013.01)  <i>C08G 18/44</i> (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2015-7035128  (22) 출원일자(국제) 2014년05월13일  심사청구일자 없음  (85) 번역문제출일자 2015년12월10일  (86) 국제출원번호 PCT/US2014/037903  (87) 국제공개번호 WO 2014/186397  국제공개일자 2014년11월20일  (30) 우선권주장  61/822,692 2013년05월13일 미국(US)</p>		<p>(71) 출원인  <b>노보머, 인코포레이티드</b>  미국 14850 뉴욕주 이타카 스위트 198 덴비 로드 950</p> <p>(72) 발명자  <b>바딩톤 시몬</b>  스위스 바젤</p> <p>(74) 대리인  <b>장훈</b></p>

전체 청구항 수 : 총 22 항

(54) 발명의 명칭 **CO<sub>2</sub> 포함 폼 및 관련 방법**

**(57) 요약**

본 발명은 폴리우레탄 폼 조성물 제조 방법을 제공한다. 그러한 방법은 A-사이드 조성물, B-사이드 조성물, 및 CO<sub>2</sub>를 혼합하여 폼 혼합물을 제공하는 것을 포함하고, 여기서 CO<sub>2</sub>의 적어도 일부가 개별적인 스트림으로서 첨가되거나, B-사이드 조성물에 용해되어 제공된다

(52) CPC특허분류

*C08G 18/706* (2013.01)  
*C08G 18/7621* (2013.01)  
*C08G 18/7664* (2013.01)  
*C08G 18/776* (2013.01)  
*C08G 18/7831* (2013.01)  
*C08G 18/79* (2013.01)  
*C08J 9/02* (2013.01)  
*C08J 9/122* (2013.01)  
*C08G 2101/00* (2013.01)

---

## 명세서

### 청구범위

#### 청구항 1

다음 단계를 포함하는, 폴리우레탄 폼 조성물 제조 방법

하나 이상의 폴리이소시아네이트를 포함하는 A-사이드 조성물을 제공하는 단계;

하나 이상의 에폭사이드 및 CO<sub>2</sub>의 공중합으로부터 유도된 하나 이상의 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올을 포함하는 B-사이드 조성물을 제공하는 단계;

B-사이드 조성물을 고온까지 가열하는 단계;

A-사이드 조성물, 가열된 B-사이드 조성물, 및 CO<sub>2</sub>를 혼합하여 폼 혼합물을 제공하는 단계; 및

폼 혼합물을 폴리우레탄 폼 조성물로 경화시키는 단계;

여기서 CO<sub>2</sub>의 적어도 일부가 개별적인 스트림으로서 첨가되거나, B-사이드 조성물에 용해되어 제공됨.

#### 청구항 2

제1항에 있어서, A-사이드 조성물, 가열된 B-사이드 조성물 및 액체 CO<sub>2</sub> 스트림은 혼합 헤드에서 동시에 혼합되어 폼 혼합물을 제공하는 방법.

#### 청구항 3

제1항에 있어서, CO<sub>2</sub>의 적어도 일부가 B-사이드 조성물에 용해되어 제공되는 방법.

#### 청구항 4

제1항에 있어서, A-사이드 조성물 및 가열된 B-사이드 조성물은 혼합 헤드에서 혼합되고 CO<sub>2</sub> 스트림은 개별적으로 A-사이드/B-사이드 혼합물에 첨가되는 방법.

#### 청구항 5

전술한 청구항 중 어느 한 항에 있어서, B-사이드 조성물은 B-사이드 조성물 중의 폴리올에 의하여 제공된 활성 -OH 말단 그룹의 몰에 대하여 약 4 몰당량 미만의 물을 포함하는 방법.

#### 청구항 6

제5항에 있어서, B-사이드 조성물은 B-사이드 조성물 중의 폴리올에 의하여 제공된 활성 -OH 말단 그룹의 몰에 대하여 약 2 몰당량 미만의 물을 포함하는 방법.

#### 청구항 7

전술한 청구항 중 어느 한 항에 있어서, B-사이드 조성물은 70 °C 내지 200 °C의 온도까지 가열되는 방법.

#### 청구항 8

전술한 청구항 중 어느 한 항에 있어서, B-사이드 조성물은 약 70 °C 내지 약 150 °C, 약 70 °C 내지 약 120 °C, 약 80 °C 내지 약 120 °C, 약 100 °C 내지 약 150 °C, 약 90 °C 내지 약 140 °C, 또는 약 90 °C 내지 130 °C의 온도까지 가열되는 방법.

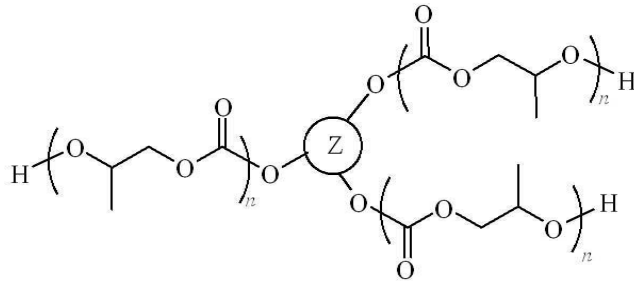
#### 청구항 9

전술한 청구항 중 어느 한 항에 있어서, B-사이드 조성물은 다음으로 이루어진 군으로부터 선택되는 폴리올을 포함하는 방법:



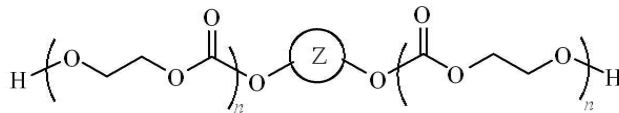
#### 청구항 11

제9항에 있어서, B-사이드 조성물은 다음 화학식의 폴리올을 포함하는 방법:



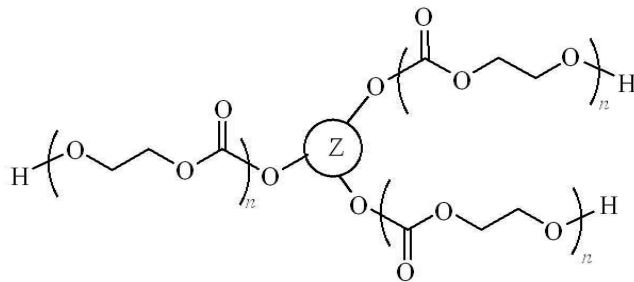
#### 청구항 12

제9항에 있어서, B-사이드 조성물은 다음 화학식의 폴리올을 포함하는 방법:



#### 청구항 13

제9항에 있어서, B-사이드 조성물은 다음 화학식의 폴리올을 포함하는 방법:



#### 청구항 14

전술한 청구항 중 어느 한 항에 있어서, 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올은 최소 95% 카보네이트 연결, 최소 97% 카보네이트 연결, 최소 99% 카보네이트 연결, 또는 본질적으로 단지 카보네이트 연결만을 가짐을 특징으로 하는 방법.

#### 청구항 15

전술한 청구항 중 어느 한 항에 있어서, 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올은 폴리(프로필렌 카보네이트)를 포함하는 방법.

#### 청구항 16

전술한 청구항 중 어느 한 항에 있어서, 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올은 폴리(에틸렌 카보네이트)를 포함하는 방법.

#### 청구항 17

전술한 항 중 어느 한 항의 방법에 의하여 제조된 폴리우레탄 폼 조성물.

#### 청구항 18

제17항에 있어서, 경화된 폼 조성물은 약 40% 미만, 약 30% 미만, 약 25% 미만, 약 20% 미만, 약 15% 미만, 또는 약 10% 미만의 경질 세그먼트 함량을 가짐을 특징으로 하는 폴리우레탄 폼 조성물.

#### 청구항 19

제17항에 있어서, 경화된 폼 조성물은 약 1:1 초과, 약 2:1 초과, 약 3:1 초과, 또는 약 5:1 초과의 우레탄 연결 대 우레아 연결의 비율을 가짐을 특징으로 하는 폴리우레탄 폼 조성물.

#### 청구항 20

제17항에 있어서, 폼은 연결 폼을 포함함을 특징으로 하는 폴리우레탄 폼 조성물.

#### 청구항 21

제17항에 있어서, 폼은 고탄력 연결 폼에 대한 ASTM 규격을 충족시킴을 특징으로 하는 폴리우레탄 폼 조성물.

#### 청구항 22

제17항에 있어서, 폼은 경질 폼을 포함함을 특징으로 하는 폴리우레탄 폼 조성물.

### 발명의 설명

#### 기술 분야

[0001] 관련 출원에 대한 교차 참조

[0002] 본 발명은 2013년 5월 13일 자의 미국 특허 가출원 제61/822,692호를 우선권으로 주장하고, 상기 문헌의 전체 내용은 본 명세서에 참조로 포함된다.

[0003] 발명의 분야

[0004] 본 발명은 폴리우레탄 폼 분야에 관한 것이다. 더욱 구체적으로, 본 발명은 지방족 폴리카보네이트 폴리올을 폴리우레탄 배합물(formulation)에 혼입하는 방법에 관한 것이다.

#### 배경 기술

[0005] 발명의 배경

[0006] 폐 CO<sub>2</sub>로부터 유용한 중합체를 제조하는 능력이, 증가된 대기 CO<sub>2</sub> 수준에 대한 우려가 커짐에 따라 최근에 증가하는 관심을 모으고 있다. 출원인은 다관능성 사슬전달제의 존재에서 에폭사이드 및 이산화 탄소의 공중합에 기초한 지방족 폴리카보네이트(APC) 폴리올의 일족을 개발했다.

[0007] 그러한 폴리올은 폴리우레탄 적용분야에서 대단한 장래성을 나타내며 이들의 혼입은 증가된, 강도, 경도, 접착, UV 안정성 및 내화학성을 포함하여 현저한 성능 장점을 유발하는 것으로 나타났다. 폼 적용분야에 대한 이러한 CO<sub>2</sub>-기초 폴리올의 적용은 이들의 혼입이 밀도 증가 없이 그리고 그래프트 폴리올의 얼마간의 바람직하지 않은 특징 없이 (예컨대 B-사이드 폴리올 배합물로부터의 스타이렌 방출(off-gassing) 및 고체의 침전) 폼 배합물의 물리적 강도를 증가시키므로 특히 매력적이다.

[0008] 폴리(프로필렌 카보네이트) 폴리올(PPC)과 같은 CO<sub>2</sub> 기초의 폴리올의 한 결점은, 산업에서 오늘날 사용되는 폴리에테르 및 폴리에스테르 폴리올에 비하여 상대적으로 높은 점도이다.

[0009] CO<sub>2</sub>-기초 폴리올 분야에서의 발전과는 별개로, 폼 배합물로의 CO<sub>2</sub>의 주입에 의하여 CO<sub>2</sub>를 전통적인 폴리에테르-기초 폼에 혼입시키기 위한 노력이 있었다. 전형적으로, 이는 폴리올 및 이소시아네이트가 조합되는 혼합 헤드(mix head)에 액체 CO<sub>2</sub>를 주입하여 달성되었다. 과거에 이러한 기술의 한 과제는 정확한 폼 경도를 달성하는 것이었다. 발포제로서 더 적은 물이 필요하므로, 결과적으로 생성된 폼 중의 경질 세그먼트의 수준이 현저하게 감소된다. 부차적인 문제는 폼 시스템의 반응성인데, CO<sub>2</sub> 상변화의 흡열이 시스템으로부터 상당한 양의 열을 제거하고 폼의 경화를 둔화시키거나 매우 높은 촉매 수준의 사용을 필요로 하기 때문이다. 보통의 폴리올이 매우 높은 온도까지 가열될 때, 점도가 낮아져 혼합의 제어가 어려워진다.

[0010] 그러므로, CO<sub>2</sub>를 폴리우레탄 폼 조성물에 혼입시키기 위한 전략 및 배합물에 대한 필요가 여전히 존재한다.

## 발명의 내용

[0011] 발명의 요약

[0012] 특히, 본 발명은 APC 폴리올이 폴리우레탄 폼으로의 CO<sub>2</sub> 주입과 관련된 여러 과제에 대한 해법을 제공한다는 인식을 포함한다.

[0013] 폼 배합물 분야에서 발포제로서 사용되는 물의 양을 감소시키는 것이 바람직할 것이다. 물은 발포 과정 동안 폴리이소시아네이트와 반응하여 발포 기체로서 CO<sub>2</sub>를 방출시킨다:



[0014] 기체 CO<sub>2</sub>가 폼을 팽창시키는 한편, 이소시아네이트의 반응으로부터 유래한 아민이 계속하여 배합물에서 추가적인 이소시아네이트와 반응하여 최종 중합체 네트워크에서 우레아 연결을 형성한다. 발포를 위한 이소시아네이트-발생 CO<sub>2</sub>에 대한 이러한 의존은 바람직하지 않은 결과를 초래할 수 있는데, B-사이드 배합물 중의 폴리올과 반응하기에 필요한 것 및 최종 폼에서 높은 '경질 세그먼트' 함량을 유발하기에 필요한 것을 넘는 다량의 이소시아네이트의 첨가를 필요로 하기 때문이다. CO<sub>2</sub> 기체를 발포제로서 직접 첨가하는 것은 CO<sub>2</sub> 자체가 이소시아네이트보다 훨씬 더 저렴하기 때문에 더 저렴할 것이다. 더욱이, 이소시아네이트 화학으로부터의 CO<sub>2</sub> 공급 분리는 폼의 경질 세그먼트 함량 및 최종 폼 중의 우레아 vs. 우레탄 연결의 비율 한계에 있어 더 많은 여유를 허용할 것이며, 이에 의하여 최종 폼의 특정 제어를 위한 더 많은 선택사항이 제공된다.

[0016] 불행하게도, 위에 기재된 바와 같이, CO<sub>2</sub>의 직접 사용은 또한 문제를 나타낸다: 전형적인 폴리에테르 폴리올-기초의 폼 배합물에 있어서, 경질 세그먼트 함량 감소가 지나치게 연질인 폼을 유발할 수 있다. 게다가, CO<sub>2</sub>의 주입은 반응 혼합물을 냉각하여 더 긴 경화 시간 또는 증가된 촉매 로딩에 대한 필요를 유발한다. 이러한 냉각 효과에 반대로 작용하도록 혼합물을 가열하는 능력은 폴리에테르 폴리올이 고온에서 취급 및 혼합이 어렵다는 사실에 의하여 제한된다.

[0017] 특히, 본 발명은 CO<sub>2</sub> 및 하나 이상의 에폭사이드의 공중합으로부터 유도된 폴리카보네이트 폴리올이 이러한 문제에 대한 해법을 제공하고 폼 발포제로서 직접 첨가된 CO<sub>2</sub>를 사용하는 개선된 방법을 제공한다는 인식을 포함한다.

[0018] 한 양태에서, 본 발명은 폴리에테르 폴리올 대신 폴리(프로필렌 카보네이트) 폴리올과 같은 폴리카보네이트 폴리올의 혼입이 폼의 경질 세그먼트 함량을 낮추는 부정적인 영향을 완화시킬 수 있다는 인식을 포함한다. 그러므로, 특정한 구체예에서, 본 발명은 폼이 유사한 특성의 폴리에테르-기초의 폼에 비하여 더 낮은 경질 세그먼트 함량을 가짐을 특징으로 하는 폼 배합물 및 최종 폼을 포함한다. 마찬가지로, 일부 구체예에서, 본 발명은 B-사이드 폴리올 배합물에 저하된 수분 함량을 포함하는 폼 배합물, 및 낮은 우레아 대 우레탄 비율을 포함하는 폼 조성물을 포함한다. 일부 구체예에서, 경화된 폼 조성물은 약 40% 미만, 약 30% 미만, 약 25% 미만, 약 20% 미만, 약 15% 미만, 또는 약 10% 미만의 경질 세그먼트 함량을 가진다. 일부 구체예에서, 경화된 폼 조성물은 약 1:1 초과, 약 2:1 초과, 약 3:1 초과, 또는 약 5:1 초과 우레탄 연결 대 우레아 연결의 비율을 가진다.

[0019] 또 다른 양태에서, 본 발명은 폴리(프로필렌 카보네이트) 폴리올과 같은 폴리카보네이트 폴리올의 고 점도가 폼 배합물의 CO<sub>2</sub> 주입의 바람직하지 않은 냉각 효과 경감에 유리할 수 있다는 인식을 포함한다. 그러므로, 특정한 구체예에서, 본 발명은 폼 배합물의 B-사이드 조성물을 고온(예를 들어 약 75 °C 위, 또는 약 100 °C 위)에서 주입하는 방법을 포함하고, 이에 의하여 CO<sub>2</sub> 주입에 의하여 야기되는 냉각을 보상하기 위한 추가적인 열이 제공된다. 그러한 방법은 고 촉매 로드를 필요로 하지 않는 신규한 속성-경화 폼 배합물을 제공한다.

[0020] 또 다른 양태에서, 본 발명은 폴리(프로필렌 카보네이트) 폴리올과 같은 폴리카보네이트 폴리올 중의 CO<sub>2</sub>의 고용해도가 CO<sub>2</sub>를 폼 배합물에 첨가하는 유용한 방법을 제공할 수 있다는 인식을 포함한다. 그러므로, 특정한 구체예에서, 본 발명은 폼 발포제로서 CO<sub>2</sub>를 제공하는 방법을 포함하고, 여기서 CO<sub>2</sub>의 적어도 일부가 폴리카보네이트

폴리올에 용해된 배합물(또는 그러한 폴리올을 포함하는 B-사이드 배합물)에 제공된다.

- [0021] 일부 구체예에서, 본 발명은 폴리우레탄 폼 조성물 제조 방법을 제공하고, 상기 방법은 다음 단계를 포함한다:
- [0022] 하나 이상의 폴리이소시아네이트를 포함하는 A-사이드 조성물을 제공하는 단계;
- [0023] 하나 이상의 에폭사이드 및 CO<sub>2</sub>의 공중합으로부터 유도된 하나 이상의 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올을 포함하는 B-사이드 조성물을 제공하는 단계;
- [0024] B-사이드 조성물을 고온까지 가열하는 단계;
- [0025] A-사이드 조성물, 가열된 B-사이드 조성물, 및 CO<sub>2</sub>를 혼합하여 폼 혼합물을 제공하는 단계; 및
- [0026] 폼 혼합물을 폴리우레탄 폼 조성물로 경화시키는 단계;
- [0027] 여기서 CO<sub>2</sub>의 적어도 일부가 개별적인 스트림으로서 첨가되거나, B-사이드 조성물에 용해되어 제공됨.

[0028] 일부 구체예에서, 본 발명은 본 명세서에 제공된 방법에 의하여 제조된 폴리우레탄 폼 조성물을 제공한다. 특정한 구체예에서, 그러한 폼은 경화된 폼이 약 40% 미만, 약 30% 미만, 약 25% 미만, 약 20% 미만, 약 15% 미만, 또는 약 10% 미만의 경질 세그먼트 함량을 가짐을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 그러한 폼은 경화된 폼 조성물이 약 1:1 초과, 약 2:1 초과, 약 3:1 초과, 또는 약 5:1 초과인 우레탄 연결 대 우레아 연결의 비율을 가짐을 특징으로 한다. 일부 구체예에서, 폼은 연질 폼(flexible foam)을 포함한다. 다른 구체예에서, 폼은 경질 폼(rigid foam)을 포함한다.

## [0029] 정의

[0030] 구체적인 관능기 및 화학적 용어의 정의가 아래에 더욱 상세히 설명된다. 본 발명의 목적을 위하여, 화학 원소는 Periodic Table of the Elements, CAS 버전, Handbook of Chemistry and Physics, 75<sup>th</sup> Ed., 내부 표지에 따라 확인되고, 구체적인 관능기는 일반적으로 상기 문헌에 기재된 바와 같이 정의된다. 추가적으로, 유기 화학의 일반적 원리, 또한 구체적인 관능기 모이어티 및 반응성이 *Organic Chemistry*, Thomas Sorrell, University Science Books, Sausalito, 1999; Smith and March *March's Advanced Organic Chemistry*, 5<sup>th</sup> 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*, 3<sup>rd</sup> Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 1987에 기재되고; 이들 각각의 전체 내용은 본 명세서에 참조로 포함된다.

[0031] 본 발명의 특정 화합물은 하나 이상의 비대칭 중심을 포함할 수 있고, 따라서 다양한 입체이성 형태, 예를 들어, 거울상이성질체 및/또는 부분입체이성질체로 존재할 수 있다. 따라서, 본 발명의 화합물 및 이의 조성물은 개별적인 거울상이성질체, 부분입체이성질체 또는 기하 이성질체의 형태일 수 있거나, 입체이성질체의 혼합물 형태일 수 있다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 화합물은 순수거울상 화합물이다. 특정한 구체예에서, 거울상이성질체 또는 부분입체이성질체의 혼합물이 제공된다.

[0032] 더욱이, 본 명세서에 기재된 특정한 화합물은 달리 명시되지 않으면 Z 또는 E 이성질체로서 존재할 수 있는 하나 이상의 이중 결합을 가질 수 있다. 본 발명은 화합물을 다른 이성질체가 실질적으로 없는 개별적인 이성질체로서, 그리고 대안으로, 다양한 이성질체의 혼합물로서, 예를 들어, 거울상이성질체의 라세미 혼합물로서 추가적으로 포함한다. 위에서 언급한 화합물 그 자체 이외에도, 본 발명은 또한 하나 이상의 화합물을 포함하는 조성물을 포함한다.

[0033] 본 명세서에서 사용된 용어 "이성질체"는 임의의 그리고 모든 기하 이성질체 및 입체이성질체를 포함한다. 예를 들어, "이성질체"는 시스- 및 트랜스-이성질체, E- 및 Z- 이성질체, R- 및 S-거울상이성질체, 부분입체이성질체, (d)-이성질체, (l)-이성질체, 이들의 라세미 혼합물, 및 이들의 다른 혼합물을, 본 발명의 범위에 속하는 것과 같이 포함한다. 예를 들어, 입체이성질체는, 일부 구체예에서, 하나 이상의 대응하는 입체 이성질체가 실질적으로 없이 제공될 수 있고, 또한 "입체이성질적으로 농축된" 것으로 지칭될 수 있다.

[0034] 특정한 거울상이성질체가 바람직한 경우, 일부 구체예에서 반대의 거울상이성질체가 실질적으로 없이 제공될 수 있고, 또한 "광학적으로 농축된" 것으로 지칭될 수 있다. 본 명세서에서 사용된 "광학적으로 농축된"은 화합물 또는 중합체가 현저하게 더 큰 비율의 한 거울상이성질체로 이루어짐을 의미한다. 특정한 구체예에서 화합물은 최소 약 90중량%의 바람직한 거울상이성질체로 이루어진다. 다른 구체예에서 화합물은 최소 약 95중량%, 98중량



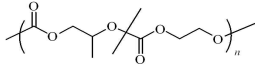
%, 또는 99중량%의 바람직한 거울상이성질체로 이루어진다. 바람직한 거울상이성질체는 카이랄 고압 액체 크로마토그래피(HPLC) 및 카이랄 염의 형성 및 결정화를 포함하는 당업자에게 공지인 임의의 방법에 의하여 라세미 혼합물로부터 분리될 수 있거나, 비대칭 합성에 의하여 제조될 수 있다. 예를 들어, Jacques, et al., *Enantiomers, Racemates and Resolutions* (Wiley Interscience, New York, 1981); Wilen, S.H., et al., *Tetrahedron* 33:2725 (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)을 참조하라.

[0035]

본 명세서에서 사용된 용어 "에폭사이드"는 치환 또는 비치환 옥시란을 지칭한다. 그러한 치환된 옥시란은 일치환 옥시란, 이치환 옥시란, 삼치환 옥시란, 및 사치환 옥시란을 포함한다. 그러한 에폭사이드는 본 명세서에 정의된 바와 같이 추가로 임의적으로 치환될 수 있다. 특정한 구체예에서, 에폭사이드는 단일 옥시란 모이어티를 포함한다. 특정한 구체예에서, 에폭사이드는 둘 이상의 옥시란 모이어티를 포함한다.

[0036]

본 명세서에서 사용된 용어 "중합체"는 높은 상대 분자 질량의 분자를 지칭하고, 이의 구조는, 실질적으로 또는 개념적으로, 낮은 상대 분자 질량의 분자로부터 유도된 단위의 다중 반복을 포함한다. 특정한 구체예에서, 중합체는 CO<sub>2</sub> 및 에폭사이드 (예를 들어, 폴리(에틸렌 카보네이트))로부터 유도된 실질적으로 교호하는 단위로 이루어진다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체는 둘 이상의 상이한 에폭사이드 단량체를 포함하는 공중합체, 삼원 중합체, 이중중합체, 블록 공중합체, 또는 테이퍼드(tapered) 이중중합체이다. 그러한 고급 중합체의 구조적 묘사에 관하여, 사전에 의하여 분리된 상이한 단량체 단위의 구조를 나타내는 관계가 본 명세서에서 사용될 수 있

다 . 이러한 구조는 달리 명시되지 않으면 임의의 비율의 묘사된 여러 상이한 단량체 단위를 포함하는 공중합체를 포함하는 것으로 해석되어야 한다. 이러한 묘사는 또한 랜덤, 테이퍼드, 블록 공중합체, 및 이들 중 임의의 둘 이상의 조합을 나타내도록 의도되고, 달리 명시되지 않으면 이들 모두가 함축된다.

[0037]

본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 및 "할로젠"은 플루오린(플루오로, -F), 클로린(클로로, -Cl), 브로민(브로모, -Br), 및 아이오딘(아이오도, -I)로부터 선택된 원자를 지칭한다.

[0038]

본 명세서에서 사용된 용어 "지방족" 또는 "지방족 그룹"은 직선-사슬(즉, 비분지형), 분지형, 또는 환형(접합, 가교, 및 스피로-접합 폴리사이클릭 포함)일 수 있고, 완전히 포화될 수 있거나 하나 이상의 불포화 단위를 포함할 수 있지만 방향족이 아닌 탄화수소 모이어티를 나타낸다. 달리 명시되지 않으면, 지방족 그룹은 1-40 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 지방족 그룹은 1-20 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 지방족 그룹은 3-20 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 지방족 그룹은 1-12 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 지방족 그룹은 1-8 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 지방족 그룹은 1-6 탄소 원자를 포함한다. 일부 구체예에서, 지방족 그룹은 1-5 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서, 지방족 그룹은 1-4 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서 지방족 그룹은 1-3 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서 지방족 그룹은 1 또는 2 탄소 원자를 포함한다. 적절한 지방족 그룹은 선형 또는 분지형, 알킬, 알켄일, 및 알킨일 그룹, 및 이들의 혼성, 예컨대 (사이클로알킬)알킬, (사이클로알켄일)알킬 또는 (사이클로알킬)알켄일을 포함하지만 이에 제한되지 않는다.

[0039]

본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로지방족"은 하나 이상의 탄소 원자가 산소, 황, 질소, 또는 인으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 원자에 의하여 독립적으로 대체된 지방족 그룹을 지칭한다. 특정한 구체예에서, 하나 내지 여섯의 탄소 원자는 산소, 황, 질소, 또는 인 중 하나 이상에 의하여 독립적으로 대체된다. 헤테로지방족 그룹은 치환 또는 비치환, 분지형 또는 비분지형, 환형 또는 비환형일 수 있고, 포화, 불포화 또는 부분적 불포화 그룹을 포함한다.

[0040]

본 명세서에서 사용된 용어 "불포화"는 모이어티가 하나 이상의 이중 또는 삼중 결합을 가짐을 의미한다.

[0041]

단독으로 또는 더 큰 모이어티의 일부로서 사용된 용어 "사이클로지방족", "카보사이클", 또는 "카보사이클릭"은 3 내지 12 일원(member)을 가지는 본 명세서에 기재된 바와 같은 포화 또는 부분적 불포화 환형 지방족 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 고리 시스템을 지칭하고, 여기서 지방족 고리 시스템은 위에서 정의되고 본 명세서에 기재된 바와 같이 임의적으로 치환된다. 사이클로지방족 그룹은, 제한 없이, 사이클로프로필, 사이클로부틸, 사이클로펜틸, 사이클로펜텐일, 사이클로헥실, 사이클로헥센일, 사이클로헵틸, 사이클로헵텐일, 사이클로옥틸, 사이클로옥텐일, 노보닐, 아다만틸, 및 사이클로옥타디엔일을 포함한다. 일부 구체예에서, 사이클로알킬은 3-6 탄소를 가진다. 용어 "사이클로지방족", "카보사이클" 또는 "카보사이클릭"은 또한 하나 이상의 방향족 또는 비

방향족 고리에 접합된 지방족 고리, 예컨대 데카하이드로나프틸 또는 테트라하이드로나프틸을 포함하고, 여기서 라디칼 또는 부착 지점은 지방족 고리 상에 있다. 특정한 구체예에서, 용어 "3- 내지 7-원 카보사이클"은 3- 내지 7-원 포화 또는 부분적 불포화 모노사이클릭 카보사이클릭 고리를 지칭한다. 특정한 구체예에서, 용어 "3- 내지 8-원 카보사이클"은 3- 내지 8-원 포화 또는 부분적 불포화 모노사이클릭 카보사이클릭 고리를 지칭한다. 특정한 구체예에서, 용어 "3- 내지 14-원 카보사이클" 및 " $C_{3-14}$  카보사이클"은 3- 내지 8-원 포화 또는 부분적 불포화 모노사이클릭 카보사이클릭 고리, 또는 7- 내지 14-원 포화 또는 부분적 불포화 폴리사이클릭 카보사이클릭 고리를 지칭한다.

[0042] 본 명세서에서 사용된 용어 "알킬"은 단일 수소 원자의 제거에 의하여 하나 내지 여섯의 탄소 원자를 포함하는 지방족 모이어티로부터 유도된 포화된 직선- 또는 분지형-사슬 탄화수소 라디칼을 지칭한다. 달리 명시되지 않으면, 알킬 그룹은 1-12 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 알킬 그룹은 1-8 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 알킬 그룹은 1-6 탄소 원자를 포함한다. 일부 구체예에서, 알킬 그룹은 1-5 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서, 알킬 그룹은 1-4 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서 알킬 그룹은 1-3 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서 알킬 그룹은 1-2 탄소 원자를 포함한다. 알킬 라디칼의 예는 메틸, 에틸, n-프로필, 이소프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸, sec-펜틸, 이소-펜틸, tert-부틸, n-펜틸, 네오펜틸, n-헥실, sec-헥실, n-헵틸, n-옥틸, n-데실, n-운데실, 도데실 등을 포함하지만 이에 제한되지 않는다.

[0043] 본 명세서에서 사용된 용어 "알켄일"은 단일 수소 원자의 제거에 의하여 최소 하나의 탄소-탄소 이중 결합을 가지는, 직선형- 또는 분지형-사슬 지방족 모이어티로부터 유도된 일가 그룹을 나타낸다. 달리 명시되지 않으면, 알켄일 그룹은 2-12 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 알켄일 그룹은 2-8 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 알켄일 그룹은 2-6 탄소 원자를 포함한다. 일부 구체예에서, 알켄일 그룹은 2-5 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서, 알켄일 그룹은 2-4 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서 알켄일 그룹은 2-3 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서 알켄일 그룹은 2 탄소 원자를 포함한다. 알켄일 그룹은, 예를 들어, 에텐일, 프로펜일, 부텐일, 1-메틸-2-부텐-1-일 등을 포함한다.

[0044] 본 명세서에서 사용된 용어 "알킨일"은 단일 수소 원자의 제거에 의하여 최소 하나의 탄소-탄소 삼중 결합을 가지는, 직선형- 또는 분지형-사슬 지방족 모이어티로부터 유도된 일가 그룹을 지칭한다. 달리 명시되지 않으면, 알킨일 그룹은 2-12 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 알킨일 그룹은 2-8 탄소 원자를 포함한다. 특정한 구체예에서, 알킨일 그룹은 2-6 탄소 원자를 포함한다. 일부 구체예에서, 알킨일 그룹은 2-5 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서, 알킨일 그룹은 2-4 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서 알킨일 그룹은 2-3 탄소 원자를 포함하고, 일부 구체예에서 알킨일 그룹은 2 탄소 원자를 포함한다. 대표적인 알킨일 그룹은 에틴일, 2-프로핀일(프로파질), 1-프로핀일 등을 포함하지만 이에 제한되지 않는다.

[0045] 본 명세서에서 사용된 용어 "알콕시"는 산소 원자를 통하여 모 분자에 부착된 위에서 정의된 알킬 그룹을 지칭한다. 알콕시의 예는, 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소프로폭시, n-부톡시, tert-부톡시, 네오펜톡시, 및 n-헥소톡시를 포함하지만 이에 제한되지 않는다.

[0046] 본 명세서에서 사용된 용어 "아실"은 카보닐-포함 관능기, 예를 들어,  $-C(=O)R$  을 지칭하고, 여기서 R 은 수소 또는 임의적으로 치환된 지방족, 헤테로지방족, 헤테로사이클릭, 아릴, 헤테로아릴 그룹이거나, (예를 들어, 수소 또는 지방족, 헤테로지방족, 아릴, 또는 헤테로아릴 모이어티로써) 치환된 (예를 들어, 카복실산, 에스테르, 또는 아마이드 관능기를 형성하는) 산소 또는 질소 포함 관능기이다.

[0047] 단독으로 또는 "아랄킬", "아랄콕시", 또는 "아릴옥시알킬"에서와 같이 더 큰 모이어티의 일부로서 사용된 용어 "아릴"은, 총 다섯 내지 20 고리 일원을 가지는 모노사이클릭 및 폴리사이클릭 고리 시스템을 지칭하고, 여기서 시스템 중의 최소 하나의 고리는 방향족이고 시스템 중의 각각의 고리는 셋 내지 열둘의 고리 일원을 포함한다. 용어 "아릴"은 용어 "아릴 고리"와 상호교환적으로 사용될 수 있다. 본 발명의 특정한 구체예에서, "아릴"은 페닐, 바이페닐, 나프틸, 안트라실 등을 포함하지만 이에 제한되지 않는 방향족 고리 시스템을 지칭하고, 이는 하나 이상의 치환기를 보유할 수 있다. 용어 "아릴"의 범위 내에, 이것이 본 명세서에서 사용된 바와 같이, 방향족 고리가 하나 이상의 추가적 고리에 접합된 그룹, 예컨대 벤조퓨란일, 인단일, 프탈이미딜, 나프티미딜, 페난트리딘일, 또는 테트라하이드로나프틸 등이 또한 포함된다. 특정한 구체예에서, 용어 "6- 내지 10-원 아릴" 및 " $C_{6-10}$  아릴"은 페닐 또는 8- 내지 10-원 폴리사이클릭 아릴 고리를 지칭한다.

[0048] 단독으로 또는 더 큰 모이어티, 예를 들어, "헤테로아랄킬", 또는 "헤테로아랄콕시"의 일부로서 사용된 용어 "헤테로아릴" 및 "헤테로아르-"는 5 내지 14 고리 원자, 바람직하게는 5, 6, 또는 9 고리 원자를 가지는 그룹;

환형 배열에 공유된 6, 10, 또는 14  $\pi$  전자를 가지는 그룹; 및 탄소 원자 이외에, 하나 내지 다섯의 헤테로원자를 가지는 그룹을 지칭한다. 용어 "헤테로원자"는 질소, 산소, 또는 황을 지칭하고, 임의의 산화된 형태의 질소 또는 황, 및 임의의 사차화된 형태의 염기성 질소를 포함한다. 헤테로아릴 그룹은, 제한 없이, 티엔일, 퓨란일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 옥사졸릴, 이속사졸릴, 옥사디아졸릴, 티아졸릴, 이소티아졸릴, 티아디아졸릴, 피리딜, 피리다진일, 피리미딘일, 피라진일, 인돌리진일, 퓨린일, 나프티리딘일, 벤조퓨란일 및 프테리딘일을 포함한다. 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로아릴" 및 "헤테로아르-"는 또한 헤테로방향족 고리가 하나 이상의 아릴, 사이클로지방족, 또는 헤테로사이클릴 고리에 접합된 그룹을 포함하고, 여기서 라디칼 또는 부착 지점은 헤테로방향족 고리 상에 있다. 비제한적 예는 인돌릴, 이소인돌릴, 벤조티엔일, 벤조퓨란일, 디벤조퓨란일, 인다졸릴, 벤즈이미다졸릴, 벤즈티아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀린일, 프탈라진일, 퀴나졸린일, 퀴녹살린일, 4H-퀴놀리진일, 카바졸릴, 아크리딘일, 페나진일, 페노티아진일, 페녹사진일, 테트라하이드로퀴놀린일, 테트라하이드로이소퀴놀린일, 및 피리도[2,3-b]-1,4-옥사진-3(4H)-온을 포함한다. 헤테로아릴 그룹은 모노- 또는 바이사이클릭일 수 있다. 용어 "헤테로아릴"은 용어 "헤테로아릴 고리", "헤테로아릴 그룹", 또는 "헤테로방향족"과 상호교환적으로 사용될 수 있고, 상기 용어들 중 어느 것이나 임의적으로 치환된 고리를 포함한다. 용어 "헤테로아릴길"은 헤테로아릴에 의하여 치환된 알킬을 지칭하고, 여기서 알킬 및 헤테로아릴 부분은 독립적으로 임의적으로 치환된다. 특정한 구체예에서, 용어 "5- 내지 10-원 헤테로아릴"은 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3 헤테로원자를 가지는 5- 내지 6-원 헤테로아릴 고리, 또는 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4 헤테로원자를 가지는 8- 내지 10-원 바이사이클릭 헤테로아릴 고리를 지칭한다. 특정한 구체예에서, 용어 "5- 내지 12-원 헤테로아릴"은 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 3 헤테로원자를 가지는 5- 내지 6-원 헤테로아릴 고리, 또는 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 4 헤테로원자를 가지는 8- 내지 12-원 바이사이클릭 헤테로아릴 고리를 지칭한다.

[0049]

본 명세서에서 사용된, 용어 "헤테로사이클", "헤테로사이클릴", "헤테로사이클릭 라디칼", 및 "헤테로사이클릭 고리"는 상호교환적으로 사용되고, 포화되거나 부분적으로 불포화되고, 탄소 원자 이외에, 하나 이상의, 바람직하게는 하나 내지 넷의 위에서 정의된 바와 같은 헤테로원자를 가지는 안정한 5- 내지 7-원 모노사이클릭 또는 7-14-원 폴리사이클릭 헤테로사이클릭 모이어티를 지칭한다. 헤테로사이클의 고리 원자에 대하여 사용될 경우, 용어 "질소"는 치환된 질소를 포함한다. 예로서, 산소, 황 또는 질소로부터 선택된 0-3 헤테로원자를 가지는 포화 또는 부분적 불포화 고리에서, 질소는 (3,4-디하이드로-2H-피롤릴에서와 같이) N, (피롤리딘일에서와 같이) NH, 또는 (N-치환된 피롤리딘일에서와 같이) <sup>+</sup>NR일 수 있다. 일부 구체예에서, 용어 "3- 내지 7-원 헤테로사이클릭"은 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 2 헤테로원자를 가지는 3- 내지 7-원 포화 또는 부분적 불포화 모노사이클릭 헤테로사이클릭 고리를 지칭한다. 일부 구체예에서, 용어 "3- 내지 12-원 헤테로사이클릭"은 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1 내지 2 헤테로원자를 가지는 3- 내지 8-원 포화 또는 부분적 불포화 모노사이클릭 헤테로사이클릭 고리, 또는 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 1-3 헤테로원자를 가지는 7- 내지 12-원 포화 또는 부분적 불포화 폴리사이클릭 헤테로사이클릭 고리를 지칭한다.

[0050]

헤테로사이클릭 고리는 안정한 구조를 야기하는 임의의 헤테로원자 또는 탄소 원자에서 펜던트 그룹에 부착될 수 있고, 임의의 고리 원자는 임의적으로 치환될 수 있다. 그러한 포화 또는 부분적 불포화 헤테로사이클릭 라디칼의 예는, 제한 없이, 테트라하이드로퓨란일, 테트라하이드로티엔일, 피롤리딘일, 피롤리온일, 피페리딘일, 피롤린일, 테트라하이드로퀴놀린일, 테트라하이드로이소퀴놀린일, 데카하이드로퀴놀린일, 옥사졸리딘일, 피페라진일, 디옥산일, 디옥솔란일, 디아제핀일, 옥사제핀일, 티아제핀일, 모폴린일, 및 퀴누클리딘일을 포함한다. 용어 "헤테로사이클", "헤테로사이클릴", "헤테로사이클릭 고리", "헤테로사이클릭 그룹", "헤테로사이클릭 모이어티", 및 "헤테로사이클릭 라디칼"은 본 명세서에서 상호교환적으로 사용되고, 또한 헤테로사이클릴 고리가 하나 이상의 아릴, 헤테로아릴, 또는 사이클로지방족 고리에 접합된 그룹, 예컨대 인돌린일, 3H-인돌릴, 크로만일, 메난트리딘일, 또는 테트라하이드로퀴놀린일을 포함하고, 여기서 라디칼 또는 부착 지점은 헤테로사이클릴 고리 상에 있다. 헤테로사이클릴 그룹은 모노- 또는 바이사이클릭일 수 있다. 용어 "헤테로사이클릴알킬"은 헤테로사이클릴에 의하여 치환된 알킬 그룹을 지칭하고, 여기서 알킬 및 헤테로사이클릴 부분은 독립적으로 임의적으로 치환된다.

[0051]

본 명세서에서 사용된 용어 "부분적 불포화"는 최소 하나의 이중 또는 삼중 결합을 포함하는 고리 모이어티를 지칭한다. 용어 "부분적으로 불포화된"는 다중 불포화 자리를 가지는 고리를 포함하도록 의도되지만, 본 명세서에 정의된 바와 같은 아릴 또는 헤테로아릴 모이어티를 포함하도록 의도되지 않는다.

[0052]

본 명세서에 기재된, 본 발명의 화합물은 "임의적으로 치환된" 모이어티를 포함할 수 있다. 일반적으로, 용어 "치환된"은, 용어 "임의적으로"가 선행하는지 여부에 관계 없이, 지명된 모이어티의 하나 이상의 수소가 적절한 치환기로 대체됨을 의미한다. 달리 명시되지 않으면, "임의적으로 치환된" 그룹은 그룹의 각각의 치환 가능한 위치에 적절한 치환기를 가질 수 있고, 임의의 주어진 구조에서 하나 초과와 위치가 명시된 그룹으로부터 선택된 하나 초과와 치환기로 치환될 수 있을 경우, 치환기는 위치마다 동일하거나 상이할 수 있다. 본 발명에서 구상된 치환기의 조합은 바람직하게는 안정하거나 화학적으로 실현 가능한 화합물의 형성을 야기하는 것이다. 본 명세서에서 사용된 용어 "안정한"은 생성, 검출, 그리고 특정한 구체예에서, 회수, 정제, 및 본 명세서에 개시된 하나 이상의 목적을 위한 사용을 허용하는 조건을 거칠 때 실질적으로 변하지 않는 화합물을 지칭한다.

[0053]

"임의적으로 치환된" 그룹의 치환 가능한 탄소 원자 상의 적절한 일가 치환기는 독립적으로 할로젠;  $-(CH_2)_{0-4}R^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}OR^\circ$ ;  $-O-(CH_2)_{0-4}C(O)OR^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}CH(OR^\circ)_2$ ;  $-(CH_2)_{0-4}SR^\circ$ ;  $R^\circ$  로 치환될 수 있는  $-(CH_2)_{0-4}Ph$ ;  $R^\circ$  로 치환될 수 있는  $-(CH_2)_{0-4}O(CH_2)_{0-1}Ph$ ;  $R^\circ$  로 치환될 수 있는  $-CH=CHPh$ ;  $-NO_2$ ;  $-CN$ ;  $-N_3$ ;  $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)_2$ ;  $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)R^\circ$ ;  $-N(R^\circ)C(S)R^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)NR^\circ_2$ ;  $-N(R^\circ)C(S)NR^\circ_2$ ;  $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)OR^\circ$ ;  $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)R^\circ$ ;  $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)NR^\circ_2$ ;  $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)OR^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}C(O)R^\circ$ ;  $-C(S)R^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}C(O)OR^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}C(O)N(R^\circ)_2$ ;  $-(CH_2)_{0-4}C(O)SR^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}C(O)OSiR^\circ_3$ ;  $-(CH_2)_{0-4}OC(O)R^\circ$ ;  $-OC(O)(CH_2)_{0-4}SR^\circ$ ;  $SC(S)SR^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}SC(O)R^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}C(O)NR^\circ_2$ ;  $-C(S)NR^\circ_2$ ;  $-C(S)SR^\circ$ ;  $-SC(S)SR^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}OC(O)NR^\circ_2$ ;  $-C(O)N(OR^\circ)R^\circ$ ;  $-C(O)C(O)R^\circ$ ;  $-C(O)CH_2C(O)R^\circ$ ;  $-C(NOR^\circ)R^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}SSR^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}S(O)_2R^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}S(O)_2OR^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}OS(O)_2R^\circ$ ;  $-S(O)_2NR^\circ_2$ ;  $-(CH_2)_{0-4}S(O)R^\circ$ ;  $-N(R^\circ)S(O)_2NR^\circ_2$ ;  $-N(R^\circ)S(O)_2R^\circ$ ;  $-N(OR^\circ)R^\circ$ ;  $-C(NH)NR^\circ_2$ ;  $-P(O)_2R^\circ$ ;  $-P(O)R^\circ_2$ ;  $-OP(O)R^\circ_2$ ;  $-OP(O)(OR^\circ)_2$ ;  $SiR^\circ_3$ ;  $-(C_{1-4})$  직선 또는 분지형 알킬렌)O-N(R<sup>°</sup>)<sub>2</sub>; 또는  $-(C_{1-4})$  직선 또는 분지형 알킬렌)C(O)O-N(R<sup>°</sup>)<sub>2</sub>이고, 여기서 각각의 R<sup>°</sup>은 아래 정의된 바와 같이 치환될 수 있고, 독립적으로 수소, C<sub>1-8</sub> 지방족, -CH<sub>2</sub>Ph, -O(CH<sub>2</sub>)<sub>0-1</sub>Ph, 또는 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0-4 헤테로원자를 가지는 5-6-원 포화, 부분적 불포화, 또는 아릴 고리이고, 또는 상기 정의에도 불구하고, 개재하는 원자(들)과 서로 합쳐진 둘의 독립적인 R<sup>°</sup>의 존재가 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0-4 헤테로원자를 가지는 3-12-원 포화, 부분적 불포화, 또는 아릴 모노- 또는 폴리사이클릭 고리를 형성하고, 이는 아래에 정의된 바와 같이 치환될 수 있다.

[0054]

R<sup>°</sup> (또는 둘의 독립적인 R<sup>°</sup>의 존재가 개재하는 원자와 함께 합쳐져 형성된 고리) 상의 적절한 일가 치환기는, 독립적으로 할로젠,  $-(CH_2)_{0-2}R^\bullet$ ,  $-(\text{할로}R^\bullet)$ ,  $-(CH_2)_{0-2}OH$ ,  $-(CH_2)_{0-2}OR^\bullet$ ,  $-(CH_2)_{0-2}CH(OR^\bullet)_2$ ;  $-O(\text{할로}R^\bullet)$ ,  $-CN$ ,  $-N_3$ ,  $-(CH_2)_{0-2}C(O)R^\bullet$ ,  $-(CH_2)_{0-2}C(O)OH$ ,  $-(CH_2)_{0-2}C(O)OR^\bullet$ ,  $-(CH_2)_{0-4}C(O)N(R^\circ)_2$ ;  $-(CH_2)_{0-2}SR^\bullet$ ,  $-(CH_2)_{0-2}SH$ ,  $-(CH_2)_{0-2}NH_2$ ,  $-(CH_2)_{0-2}NHR^\bullet$ ,  $-(CH_2)_{0-2}NR^\bullet_2$ ,  $-NO_2$ ,  $-SiR^\bullet_3$ ,  $-OSiR^\bullet_3$ ,  $-C(O)SR^\bullet$ ,  $-(C_{1-4})$  직선 또는 분지형 알킬렌)C(O)OR<sup>°</sup>, 또는  $-SSR^\bullet$ 이고, 여기서 각각의 R<sup>°</sup>은 치환되지 않거나 "할로"가 선행하는 경우 하나 이상의 할로젠만으로 치환되고, C<sub>1-4</sub> 지방족, -CH<sub>2</sub>Ph, -O(CH<sub>2</sub>)<sub>0-1</sub>Ph, 또는 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0-4 헤테로원자를 가지는 5-6-원 포화, 부분적 불포화, 또는 아릴 고리로부터 독립적으로 선택된다. R<sup>°</sup>의 포화된 탄소 원자 상의 적절한 이가 치환기는 =O 및 =S를 포함한다.

[0055]

"임의적으로 치환된" 그룹의 포화된 탄소 원자 상의 적절한 이가 치환기는 다음을 포함하고: =O, =S, =NNR<sup>\*</sup><sub>2</sub>, =NNHC(O)R<sup>\*</sup>, =NNHC(O)OR<sup>\*</sup>, =NNHS(O)<sub>2</sub>R<sup>\*</sup>, =NR<sup>\*</sup>, =NOR<sup>\*</sup>,  $-O(C(R^\circ_2))_{2-3}O^-$ , 또는  $-S(C(R^\circ_2))_{2-3}S^-$ , 여기서 각각의 독립적인 R<sup>\*</sup>의 존재는 수소, 아래 정의된 바와 같이 치환될 수 있는 C<sub>1-6</sub> 지방족, 또는 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0-4 헤테로원자를 가지는 비치환 5-6-원 포화, 부분적 불포화, 또는 아릴 고리로부터 선택된다. "임의적으로 치환된" 그룹의 이웃자리(vicinal) 치환 가능한 탄소에 결합된 적절한 이가 치환기는:  $-O(CR^\circ_2)_{2-3}O^-$ 를 포함하고, 여기서 각각의 독립적인 R<sup>\*</sup>의 존재는 수소, 아래 정의된 바와 같이 치환될 수 있는 C<sub>1-6</sub> 지방족, 또는 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0-4 헤테로원자를 가지는 비치환 5-6-원 포화, 부분적 불포화, 또는 아릴 고리로부터 선택된다.



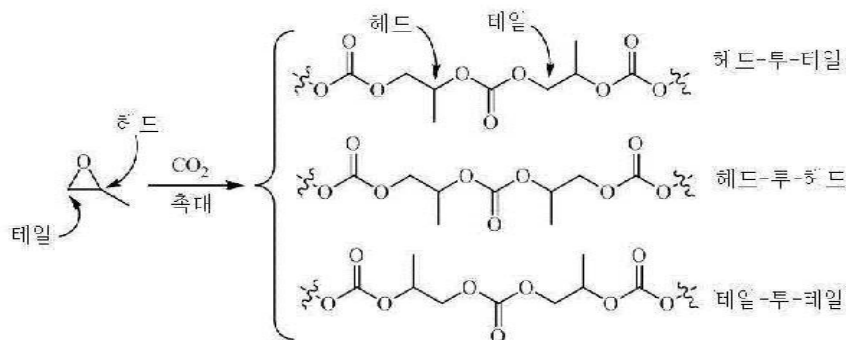
[0056]  $R^\bullet$ 의 지방족 그룹 상의 적절한 치환기는 할로젠,  $-R^\bullet$ ,  $-(\text{할로}R^\bullet)$ ,  $-\text{OH}$ ,  $-\text{OR}^\bullet$ ,  $-\text{O}(\text{할로}R^\bullet)$ ,  $-\text{CN}$ ,  $-\text{C}(\text{O})\text{OH}$ ,  $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^\bullet$ ,  $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{NHR}^\bullet$ ,  $-\text{NR}_2^\bullet$ , 또는  $-\text{NO}_2$ 를 포함하고, 여기서 각각의  $R^\bullet$ 은 치환되지 않거나 "할로"가 선행하는 경우 하나 이상의 할로젠만으로 치환되고, 독립적으로  $\text{C}_{1-4}$  지방족,  $-\text{CH}_2\text{Ph}$ ,  $-\text{O}(\text{CH}_2)_{0-1}\text{Ph}$ , 또는 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0-4 헤테로원자를 가지는 5-6-원 포화, 부분적 불포화, 또는 아릴 고리이다.

[0057] "임의적으로 치환된" 그룹의 치환 가능한 질소 상의 적절한 치환기는  $-R^+$ ,  $-\text{NR}_2^+$ ,  $-\text{C}(\text{O})R^+$ ,  $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^+$ ,  $-\text{C}(\text{O})\text{C}(\text{O})R^+$ ,  $-\text{C}(\text{O})\text{CH}_2\text{C}(\text{O})R^+$ ,  $-\text{S}(\text{O})_2R^+$ ,  $-\text{S}(\text{O})_2\text{NR}_2^+$ ,  $-\text{C}(\text{S})\text{NR}_2^+$ ,  $-\text{C}(\text{NH})\text{NR}_2^+$ , 또는  $-\text{N}(\text{R}^+)\text{S}(\text{O})_2R^+$ 를 포함하고; 여기서 각각의  $R^+$ 은 독립적으로 수소, 아래 정의된 바와 같이 치환될 수 있는  $\text{C}_{1-6}$  지방족, 비치환  $-\text{OPh}$ , 또는 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0-4 헤테로원자를 가지는 비치환 5-6-원 포화, 부분적 불포화, 또는 아릴 고리이고, 또는, 위의 정의에도 불구하고, 개재하는 원자(들)와 서로 합쳐진 둘의 독립적인  $R^+$ 의 존재가 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0-4 헤테로원자를 가지는 비치환 3-12-원 포화, 부분적 불포화, 또는 아릴 모노- 또는 바이사이클릭 고리를 형성한다.

[0058]  $R^+$ 의 지방족 그룹 상의 적절한 치환기는 독립적으로 할로젠,  $-R^\bullet$ ,  $-(\text{할로}R^\bullet)$ ,  $-\text{OH}$ ,  $-\text{OR}^\bullet$ ,  $-\text{O}(\text{할로}R^\bullet)$ ,  $-\text{CN}$ ,  $-\text{C}(\text{O})\text{OH}$ ,  $-\text{C}(\text{O})\text{OR}^\bullet$ ,  $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{NHR}^\bullet$ ,  $-\text{NR}_2^\bullet$ , 또는  $-\text{NO}_2$ 이고, 여기서 각각의  $R^\bullet$ 은 치환되지 않거나 "할로"가 선행하는 경우 하나 이상의 할로젠만으로 치환되고, 독립적으로  $\text{C}_{1-4}$  지방족,  $-\text{CH}_2\text{Ph}$ ,  $-\text{O}(\text{CH}_2)_{0-1}\text{Ph}$ , 또는 질소, 산소, 또는 황으로부터 독립적으로 선택된 0-4 헤테로원자를 가지는 5-6-원 포화, 부분적 불포화, 또는 아릴 고리이다.

[0059] 본 명세서에서 치환기가 기재될 때, 용어 "라디칼" 또는 "임의적으로 치환된 라디칼"이 때로 사용된다. 이 맥락에서, "라디칼"은 구조에 대한 부착이 가능한 위치를 가지는 모이어티 또는 관능기를 의미하고, 상기 위치에 치환기가 결합된다. 일반적으로 부착 지점은 치환기가 독립적인 중성 분자일 경우 치환기보다는 수소 원자를 가질 것이다. 이 맥락에서 용어 "라디칼" 또는 "임의적으로-치환된 라디칼"은 이에 따라 "그룹" 또는 "임의적으로-치환된 그룹"과 상호교환 가능하다.

[0060] 본 명세서에서 사용된 "용어 헤드-투-테일" 또는 "HT"는 중합체 사슬 중의 인접한 반복 단위의 위치화학(regiochemistry)을 지칭한다. 예를 들어, 폴리(프로필렌 카보네이트) (PPC)의 맥락에서, 세 가지의 위치화학적 가능성에 기반한 용어 헤드-투-테일이 아래 묘사된다:



[0061]

[0062] 용어 "헤드-투-테일 비율" 또는 (H:T)는 헤드-투-테일 연결 대 모든 다른 위치화학적 가능성의 합계의 비율을 지칭한다. 중합체 구조의 묘사에 관하여, 비록 단량체 단위의 특정한 위치화학적 배향이 본 명세서의 중합체 구조의 표현에서 나타날 수 있기는 하지만, 이는 중합체 구조를 나타난 특정한 위치화학적 배열로 제한하려는 의도가 아니고, 달리 명시되지 않으면 묘사된 것, 반대의 위치화학, 랜덤 혼합물, 아이소택틱(isotactic) 물질, 신디오택틱(syndiotactic) 물질, 라세미 물질, 및/또는 거울상농축된 물질 및 이들의 임의의 조합을 포함하는 모든 위치화학적 배열을 포함하도록 해석되어야 한다.

[0063] 본 명세서에서 사용된 용어 "알콕시화"는 분자 상의 하나 이상의 관능기에 (통상적으로 관능기는 알코올, 아민, 또는 카복실산이지만, 이들로 엄격하게 제한되지 않음) 하이드록시-종결된 알킬 사슬이 첨부됨을 의미한다. 알콕시화 화합물은 단일 알킬 그룹을 포함할 수 있거나, 소중합체 모이어티, 예컨대 하이드록실-종결된 폴리에테

리일 수 있다. 알콕시화 물질은 에폭사이드로써 관능기를 처리하여 모체 화합물로부터 유도될 수 있다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0064] 발명의 상세한 설명

[0065] 일부 구체예에서, 본 발명은 폴리우레탄 폼 제조 방법을 제공한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 방법은 폴리우레탄 폼 조성물로의 CO<sub>2</sub>의 직접 혼입을 위한 개선된 전략을 제공한다. 특정한 구체예에서, 제공된 본 발명의 방법은 두 가지 특징에 의하여 광범하게 정의된다:

[0066] 폼을 위한 발포제로서 사용되는 적어도 약간의 CO<sub>2</sub>가 배합물에 직접 첨가되는 특징 (즉 물과 이소시아네이트의 반응에 의하여 인 시투로 생성되는 것과 대조적임); 및

[0067] 폼의 B-사이드 배합물이 CO<sub>2</sub> 및 하나 이상의 에폭사이드의 공중합으로부터 유도된 APC 폴리올을 포함하는 특징.

[0068] 특정한 구체예에서, 본 발명은 다음 단계를 포함하는 폴리우레탄 폼 조성물 제조 방법을 제공한다:

[0069] 하나 이상의 폴리이소시아네이트를 포함하는 A-사이드 조성물을 제공하는 단계;

[0070] 하나 이상의 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올을 포함하는 B-사이드 조성물을 제공하는 단계;

[0071] B-사이드 조성물을 고온까지 가열하는 단계;

[0072] A-사이드 조성물, 가열된 B-사이드 조성물, 및 CO<sub>2</sub>를 혼합하여 폼 혼합물을 제공하는 단계; 및

[0073] 폼 혼합물을 폴리우레탄 폼 조성물로 경화시키는 단계;

[0074] 여기서 CO<sub>2</sub>의 적어도 일부가 개별적인 스트림으로서 첨가되거나, B-사이드 조성물에 용해되어 제공됨.

[0075] 특정한 구체예에서, 방법은 A-사이드 조성물 및 B-사이드 조성물이 혼합되는 위치에 개별적인 공급스트림으로서 CO<sub>2</sub>를 첨가하는 것을 포함한다. 다른 구체예에서, 방법은 A-사이드 조성물 및 B-사이드 조성물의 혼합물에 개별적인 공급스트림으로서 액체 CO<sub>2</sub>를 첨가하는 것을 포함한다 (즉 CO<sub>2</sub>가 A-사이드 및 B-사이드의 혼합 이후 지점에 첨가된다). 특정한 구체예에서, CO<sub>2</sub>를 첨가하는 단계는 액체 CO<sub>2</sub> 스트림을 공급하는 것을 포함한다. 특정한 구체예에서, CO<sub>2</sub>를 첨가하는 단계는 압축된 기체 스트림으로서 CO<sub>2</sub>를 공급하는 것을 포함한다.

[0076] 특정한 구체예에서, 방법은 A-사이드를 B-사이드와 혼합하기 전에 APC 폴리올에 CO<sub>2</sub>를 용해하는 것을 포함한다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물은 용해된 CO<sub>2</sub>를 포함하고, B-사이드 조성물은 고압에서 제공된다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물은 다른 용해된 기체, 예컨대 질소, 아르곤, 헬륨, 탈산소 공기, 탄화수소, 플루오린화 탄화수소 등을, 이산화 탄소 대신에 또는 이에 추가하여 포함할 수 있다.

[0077] 특정한 구체예에서, 방법은 APC 폴리올(또는 APC 폴리올을 포함하는 B-사이드 조성물)을 약 50 °C 위의 온도까지 가열하는 것을 포함한다. 특정한 구체예에서, 폴리올 또는 B-사이드 조성물은 약 70 °C, 약 75 °C, 약 80 °C, 약 90 °C, 약 100 °C, 약 110 °C, 약 120 °C, 약 140 °C, 약 160 °C, 또는 약 180 °C의 온도까지 가열된다.

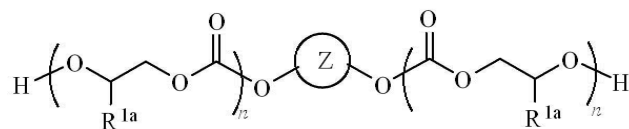
[0078] 특정한 구체예에서, 본 발명의 방법은 B-사이드 조성물이 제조되는 폼의 유형에 대하여 전형적인 폼 배합물(즉 경질, 연질, 점탄성 등)과 비교하여 비교적 적은 양의 물을 포함함을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 방법은 B-사이드 조성물이 B-사이드 배합물에 존재하는 폴리올에 의하여 제공된 활성 -OH의 물에 대하여 10 미만의 몰당량의 물을 포함함을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 방법은 B-사이드 조성물이 B-사이드 배합물에 존재하는 폴리올에 의하여 제공된 활성 -OH 그룹의 물에 대하여 8 미만, 6 미만, 5 미만, 4 미만, 3 미만, 또는 2 미만의 몰당량의 물을 포함함을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 방법은 B-사이드 조성물이 B-사이드 배합물에 존재하는 폴리올에 의하여 제공된 활성 -OH의 물에 대하여 0 내지 5 몰당량의 물을 포함함을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 방법은 B-사이드 조성물이 물의 분자보다 더 많은 폴리올 -OH 그룹을 포함함을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 방법은 B-사이드 조성물이 물의 분자의 최소 두 배의 폴리올 -OH 그

를 포함함을 특징으로 한다.

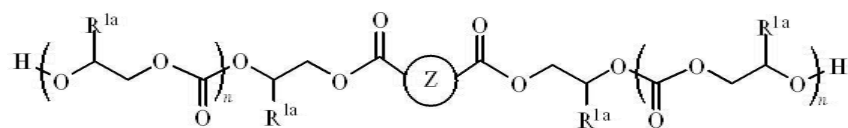
[0079] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올은 CO<sub>2</sub> 및 하나 이상의 에폭사이드의 공중합으로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올은 CO<sub>2</sub> 및 프로필렌 옥사이드의 공중합으로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올은 CO<sub>2</sub> 및 혼합물 프로필렌 옥사이드 및 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된 최소 하나의 다른 에폭사이드의 공중합으로부터 유도된다: 에틸렌 옥사이드, 1-부텐 옥사이드, 2-부텐 옥사이드, 부타디엔 모노에폭사이드, 1-헥센 옥사이드, 사이클로헥센 옥사이드, 사이클로펜텐 옥사이드, 3-비닐 사이클로헥센 옥사이드, 3-에틸 사이클로헥센 옥사이드, 에피클로로하이드린, 글리시돌 에테르, 글리시돌 에스테르, 및 고급 알파 올레핀의 에폭사이드.

[0080] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올은 CO<sub>2</sub> 및 에틸렌 옥사이드의 공중합으로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 고도로 교호하는 폴리카보네이트 폴리올은 CO<sub>2</sub> 및 혼합물 에틸렌 옥사이드 및 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된 최소 하나의 다른 에폭사이드의 공중합으로부터 유도된다: 1-부텐 옥사이드, 2-부텐 옥사이드, 부타디엔 모노에폭사이드, 1-헥센 옥사이드, 사이클로헥센 옥사이드, 사이클로펜텐 옥사이드, 3-비닐 사이클로헥센 옥사이드, 3-에틸 사이클로헥센 옥사이드, 에피클로로하이드린, 글리시돌 에테르, 글리시돌 에스테르, 및 고급 알파 올레핀의 에폭사이드.

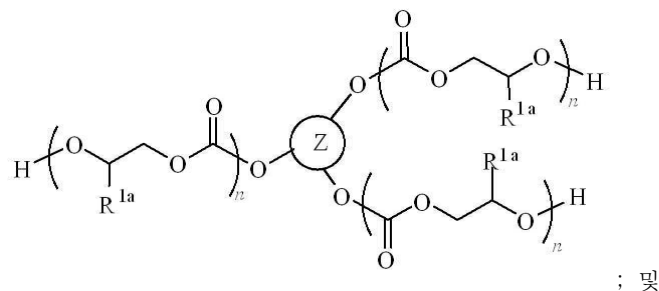
[0081] 적절한 APC 폴리올은 이 명세서 마지막의 부록 A에 기재된 것을 포함한다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물은 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된 폴리올을 포함한다:



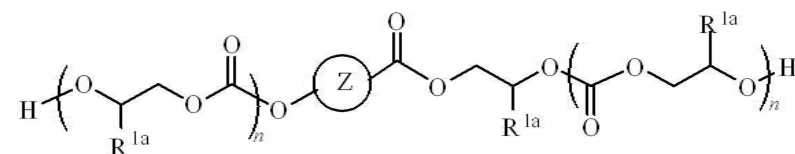
[0082] ;



[0083] ;



; 및



[0084] ,

[0085] 여기서  $n$ 은 각각의 존재에서, 독립적으로 약 2 내지 약 100의 정수이고;

[0086]  $\text{Z}$ 는 다가 모이어티이고; 그리고

[0087]  $\text{R}^{1a}$ 는, 독립적으로 중합체 사슬에서 각각의 존재에서, -H, -CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>, -CH<sub>2</sub>Cl, -CH<sub>2</sub>OR<sup>x</sup>, -CH<sub>2</sub>OC(O)R<sup>x</sup>, 및

$-(CH_2)_qCH_3$ 로 이루어진 군으로부터 선택되고, 여기서 각각의  $R^x$ 는 독립적으로  $C_{1-20}$  지방족,  $C_{1-20}$  헤테로지방족, 3- 내지 14-원 카보사이클릭, 6- 내지 10-원 아릴, 5- 내지 10-원 헤테로아릴, 및 3- 내지 12-원 헤테로사이클릭으로 이루어진 군으로부터 선택된 임의적으로 치환된 모이어티이고,  $q$ 는 2 내지 40의 정수이다.

[0088] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 고도로 교호하는 APC 폴리올이 전술한 단락에 나타난 구조 중 하나를 가지는 경우에,  $R^{1a}$ 는  $-CH_3$ 이다. 특정한 구체예에서,  $R^{1a}$ 는  $-CH_2CH_3$ 이다. 특정한 구체예에서,  $R^{1a}$ 는  $-H$  및  $-CH_3$ 의 혼합이다. 특정한 구체예에서,  $R^{1a}$ 는  $-H$  및  $-CH_2CH_3$ 의 혼합이다. 특정한 구체예에서,  $R^{1a}$ 는  $-H$  및  $-CH_2Cl$ 의 혼합이다. 특정한 구체예에서,  $R^{1a}$ 는  $-CH_3$  및  $-CH_2CH_3$ 의 혼합이다. 특정한 구체예에서,  $R^{1a}$ 는  $-CH_3$  및  $-CH_2Cl$ 의 혼합이다.

[0089] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 고도로 교호하는 APC 폴리올은 약 500 g/mol 내지 약 7,500 g/mol의 Mn을 가짐을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 약 3,000 g/mol 내지 약 6,000 g/mol의 Mn을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 약 500 g/mol 내지 약 1,500 g/mol의 Mn을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 약 1,000 g/mol 내지 약 2,500 g/mol의 Mn을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 약 2,500 g/mol 내지 약 5,000 g/mol의 Mn을 가진다.

[0090] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 고도로 교호하는 APC 폴리올은 70 °C에서 약 2,500 내지 약 10,000 cp의 점도를 가짐을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 70 °C에서 약 3,000 내지 약 8,000 cp의 점도를 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 70 °C에서 약 5,000 내지 약 7,000 cp의 점도를 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 70 °C에서 약 1,500 내지 약 3,000 cp의 점도를 가진다.

[0091] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 고도로 교호하는 APC 폴리올은 2의 관능성 수(functional number)를 가짐을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 고도로 교호하는 APC 폴리올은 2 초과와 관능성 수를 가짐을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 2 내지 3의 관능성 수를 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 대략 2, 대략 2.4, 대략 2.6, 대략 2.7, 대략 2.8, 대략 2.9, 또는 대략 3의 관능성 수를 가진다.

[0092] 특정한 구체예에서, 본 발명의 방법은 B-사이드 조성물이 고도로 교호하는 구조를 가지는 APC 폴리올을 포함함을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 그러한 조성물은 90% 초과와 카보네이트 연결 및 10% 미만의 에테르 연결을 포함하는 APC 폴리올 사슬을 포함한다. 특정한 구체예에서, 그러한 조성물은 92% 초과, 93% 초과, 94% 초과, 95% 초과, 96% 초과, 97% 초과, 98% 초과, 99% 초과, 또는 99.5% 초과와 카보네이트 연결을 포함하는 APC 폴리올 사슬을 포함한다. 특정한 구체예에서, 조성물은 (예를 들어  $^1H$  또는  $^{13}C$  NMR 분광법에 의하여 결정된) 검출 가능한 에테르 연결이 없는 APC 폴리올 사슬을 포함한다.

[0093] 특정한 구체예에서, 본 발명의 방법은 B-사이드 조성물이 좁은 분자량 분포를 가지는 APC 폴리올을 포함함을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올의 PDI는 약 2 미만이다. 특정한 구체예에서, PDI는 약 1.6 미만, 약 1.4 미만, 약 1.3 미만, 약 1.2 미만, 또는 약 1.1 미만이다.

[0094] 상기 방법에서, A-사이드는 폼 배합물에 적절한 임의의 폴리이소시아네이트를 포함할 수 있다. 그러한 여러 조성물이 당해 분야에 공지이다. 특정한 구체예에서, 본 명세서에서 제공된 방법에서 A-사이드 조성물은 아래 부록 B에 나열된 물질 중 하나 이상을 포함한다.

[0095] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물은 APC 폴리올을 하나 이상의 추가적인 폴리올 및/또는 하나 이상의 첨가제와 조합으로 포함한다. 특정한 구체예에서, 첨가제는 용매, 물, 촉매, 계면활성제, 발포제, 착색제, UV 안정화제, 방염제, 항미생물제, 가소제, 기포-개방제, 대전방지 조성물, 상용화제 등으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물은 이소시아네이트와의 결합-형성 반응에 참여하는 추가적인 반응성 소분자, 예컨대 아민, 알코올, 티올, 또는 카복실산을 포함한다.

#### [0096] 추가적인 폴리올

[0097] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 조성물은 위에 기재된 바와 같은 APC 폴리올을 폴리우레탄 폼 조성물에서 전통적으로 사용되는 것과 같은 하나 이상의 추가적인 폴리올과 조합으로 포함한다. 본 발명의 B-사이드 조성물이 하나 이상의 APC 폴리올 및 하나 이상의 추가적인 폴리올의 혼합물을 포함하거나 이로부터 유도되는 구체예에서, 추가적인 폴리올은 폴리에테르 폴리올, 폴리에스테르 폴리올, 폴리스타이렌 폴리올, 폴리에테르-카보



네이트 폴리올, 폴리에테르-에스테르 카보네이트, 및 이들 중 임의의 둘 이상의 혼합물로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 조성물은 본 명세서에 기재된 바와 같은 하나 이상의 APC 폴리올 및 다음 상품명으로 상용화되어 입수 가능한 물질로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 다른 폴리올의 혼합물을 포함하거나 이로부터 유도된다: Voranol® (Dow), SpecFlex® (Dow), Tercarol® (Dow), Caradol® (Shell), Hyperliter®, Acclaim® (Bayer Material Science), Ultracel® (Bayer Material Science), Desmophen® (Bayer Material Science), 및 Arcol® (Bayer Material Science).

[0098]

특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 조성물은 폴리에테르 폴리올을 본 명세서에 기재된 바와 같은 하나 이상의 APC 폴리올과 조합으로 포함하는 혼합물을 포함한다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리에테르 폴리올은 약 500 내지 약 10,000 g/mol의 Mn을 가짐을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리에테르 폴리올은 약 500 내지 약 5,000 g/mol의 Mn을 가진다. 특정한 구체예에서, 폴리에테르 폴리올은 폴리에틸렌 글리콜을 포함한다. 특정한 구체예에서, 폴리에테르 폴리올은 폴리프로필렌 글리콜을 포함한다.

[0099]

존재할 수 있는 폴리에테르 폴리올은 공지 방법에 의하여 획득할 수 있는 것을 포함하고, 예를 들어, 폴리에테르 폴리올 이 -알킬렌 라디칼에 2 내지 4 탄소를 가지는 하나 이상의 알킬렌 옥사이드로부터- 알칼리 하이드록사이드, 예컨대 소듐 하이드록사이드 또는 포타슘 하이드록사이드 또는 알칼리 알코올레이트, 예컨대 소듐 메틸레이트, 소듐 에틸레이트, 포타슘 에틸레이트, 또는 촉매로서 포타슘 이소프로필레이트로써 그리고 2 내지 8, 바람직하게는 3 내지 8, 반응성 수소를 포함하는 최소 하나의 개시제 분자의 첨가와 함께 음이온성 중합에 의하여, 또는 루이스산, 예컨대 안티모니 펜타클로라이드, 보론 트리플루오라이드 에테레이트 등, 또는 촉매로서 표백토로써 양이온성 중합에 의하여 제조될 수 있다. 1,3-프로필렌 옥사이드, 1,2- 및 2,3 부틸렌 옥사이드, 아밀렌 옥사이드, 스타이렌 옥사이드, 및 바람직하게는 에틸렌 옥사이드 및 프로필렌 옥사이드 및 이들 옥사이드의 혼합과 같은 임의의 적절한 알킬렌 옥사이드가 사용될 수 있다. 폴리알킬렌 폴리에테르 폴리올은 다른 출발 물질, 예컨대 테트라하이드로퓨란 및 알킬렌 옥사이드-테트라하이드로퓨란 혼합물; 에피할로하이드린, 예컨대 에피클로로하이드린; 또한 아랄킬렌 옥사이드, 예컨대 스타이렌 옥사이드로부터 제조될 수 있다. 폴리알킬렌 폴리에테르 폴리올은 일차 또는 이차 하이드록실 그룹을 가질 수 있고, 개시제에 프로필렌 옥사이드 첨가로부터 바람직하게는 이차 하이드록실 그룹을 가질 수 있는데 이들 그룹이 반응하기에 더 느리기 때문이다. 폴리에테르 폴리올 중에서 폴리옥시에틸렌 글리콜, 폴리옥시프로필렌 글리콜, 폴리옥시부틸렌 글리콜, 폴리테트라메틸렌 글리콜, 블록 공중합체, 예를 들어, 폴리옥시프로필렌 및 폴리옥시에틸렌 글리콜, 폴리-1,2-옥시부틸렌 및 폴리옥시에틸렌 글리콜, 폴리-1,4-테트라메틸렌 및 폴리옥시에틸렌 글리콜, 및 둘 이상의 알킬렌 옥사이드의 블렌드 또는 연속 첨가로부터 제조된 공중합체 글리콜의 조합이 포함된다. 폴리알킬렌 폴리에테르 폴리올은, 예를 들어, Interscience Publishers, Inc.에 의하여 출판된 Wurtz in Encyclopedia of Chemical Technology, Vol. 7, pp. 257-262 (1951) 또는 미국 특허 제1,922,459호에 개시된 공정과 같은 임의의 공지 공정에 의하여 제조될 수 있다. 폴리에테르는 다가 알코올의 알킬렌 옥사이드 첨가 생성물, 예컨대 에틸렌 글리콜, 프로필렌 글리콜, 디프로필렌 글리콜, 트리메틸렌 글리콜, 1,2- 부탄디올, 1,5-펜탄디올, 1,6-헥산디올, 1,7-헵탄디올, 하이드로퀴논, 레소시놀 글리세롤, 글리세린, 1,1,1-트리메틸올-프로판, 1,1,1-트리메틸올에탄, 펜타에리스리톨, 1,2,6-헥산트리올, α-메틸 글루코사이드, 수크로스, 및 소르비톨을 포함한다. 페놀, 예컨대 통상적으로 비스페놀 A로 알려진 2,2-비스(4-하이드록시페닐)-프로판으로부터 유도된 화합물이 용어 "다가 알코올" 내에 또한 포함된다. 일부 구체예에서, 폴리올 조성물은 적어도 둘의 일차 또는 이차 아민 그룹을 가지는 화합물, 4 이상의 하이드록실 그룹을 가지는 다가 알코올, 예컨대 수크로스, 또는 적어도 4 하이드록실 그룹을 가지는 다가 알코올을 사용하는 개시제 및 적어도 둘의 일차 또는 이차 아민 그룹을 가지는 화합물의 혼합물로서 개시되는 최소 하나의 폴리올을 포함한다. 알킬렌 옥사이드와 축합될 수 있는 적절한 유기 아민 개시제는 방향족 아민-예컨대 아닐린, N-알킬페닐렌-디아민, 2,4'-, 2,2'-, 및 4,4'-메틸렌디아닐린, 2,6- 또는 2,4-톨루엔디아민, 이웃자리 톨루엔디아민, o-클로로아닐린, p-아미노아닐린, 1,5-디아미노나프탈렌, 메틸렌 디아닐린, 아닐린 및 포름알데하이드의 다양한 축합 생성물, 및 이성질체 디아미노톨루엔; 및 지방족 아민, 예컨대 모노-, 디-, 및 트리알칸올아민, 에틸렌 디아민, 프로필렌 디아민, 디에틸렌트리아민, 메틸아민, 트리이소프로판올아민, 1,3-디아미노프로판, 1,3-디아미노부탄, 및 1,4-디아미노부탄을 포함한다. 특정한 구체예에서, 아민은 모노에탄올아민, 이웃자리 톨루엔디아민, 에틸렌디아민, 및 프로필렌디아민을 포함한다. 일부 구체예에서, 본 발명에서 사용하기 위하여 고려된 방향족 폴리에테르 폴리올은 미국 특허 제4,883,826호; 제4,939,182호; 및 제5,120, 815호에 개시된 것과 같은 흔히 "마니히(Mannich)" 폴리올로 지칭되는 페놀/포름알데하이드/알칸올아민 수지의 알킬렌 옥사이드 부가물이 다.

[0100]

추가적인 폴리올이 존재하는 특정한 구체예에서, 이들은 총 폴리올 함량의 약 5 중량 퍼센트 내지 약 95 중량 퍼센트를 차지하고, 폴리올 혼합물의 나머지가 위에 그리고 본 명세서의 특정 구체예에 기재된 하나 이상의

APC 폴리올로 이루어진다. 특정한 구체예에서, B-사이드 혼합물의 총 폴리올 함량의 최대 약 75 중량 퍼센트가 APC 폴리올이다. 특정한 구체예에서, B-사이드 혼합물의 총 폴리올 함량의 최대 약 50 중량 퍼센트가 APC 폴리올이다. 특정한 구체예에서, B-사이드 혼합물의 총 폴리올 함량의 최대 약 40 중량 퍼센트, 최대 약 30 중량 퍼센트, 최대 약 25 중량 퍼센트, 최대 약 20 중량 퍼센트, 최대 약 15 중량 퍼센트, 또는 최대 약 10 중량 퍼센트가 APC 폴리올이다. 특정한 구체예에서, B-사이드 혼합물의 총 폴리올 함량의 최소 약 5 중량 퍼센트가 APC 폴리올이다. 특정한 구체예에서, B-사이드 혼합물의 총 폴리올 함량의 최소 약 10 중량 퍼센트가 APC 폴리올이다. 특정한 구체예에서, B-사이드 혼합물의 총 폴리올 함량의 최소 약 15 중량 퍼센트, 최소 약 20 중량 퍼센트, 최소 약 25 중량 퍼센트, 최소 약 40 중량 퍼센트, 또는 최소 약 50 중량 퍼센트가 APC 폴리올이다.

#### [0101] 촉매

[0102] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물은 폴리올(및 존재할 경우 물)과 폴리이소시아네이트의 반응을 위한 하나 이상의 촉매를 포함한다. 삼차 아민 화합물 및 유기금속 화합물을 포함하여 임의의 적절한 우레탄 촉매가 사용될 수 있다. 예시적인 삼차 아민 화합물은 트리에틸렌디아민, N-메틸모폴린, N,N-디메틸사이클로헥실아민, 펜타메틸디에틸렌트리아민, 테트라메틸에틸렌디아민, 1-메틸-4-디메틸아미노에틸피페라진, 3-메톡시-N-디메틸프로필아민, N-에틸모폴린, 디에틸에탄올아민, N-코코모폴린, N,N-디메틸-N',N'-디메틸 이소프로필프로필렌디아민, N,N-디에틸-3-디에틸아미노프로필아민, 디메틸벤질아민, 1,8-디아자바이사이클로헥센-7-엔 (DBU), 1,4-디아자바이사이클로[2.2.2]옥탄 (DABCO) 트리아자바이사이클로데센 (TBD), 및 N-메틸트리아자바이사이클로데센 (MTBD)을 포함한다. 예시적인 유기금속 촉매는 유기수은, 유기납, 유기철 및 유기주석 촉매를 포함한다. 적절한 주석 촉매는 스테너스 클로라이드, 카복실산의 주석 염, 예컨대 디부틸틴 디라우레이트, 또한 다른 유기금속 화합물, 예컨대 미국 특허 제2,846,408호 및 기타에 개시된 것을 포함한다. 폴리이소시아나이드, 예컨대 알칼리 금속 알콕사이드를 생성하는 폴리이소시아네이트의 삼합체화를 위한 촉매가 또한 본 명세서에서 임의적으로 사용될 수 있다. 그러한 촉매는 폴리우레탄 또는 폴리이소시아나이드 형성의 속도를 측정 가능하게 증가시키는 양으로 사용된다.

[0103] 본 발명의 B-사이드 조성물이 촉매를 포함하는 특정한 구체예에서, 촉매는 주석 기초의 물질을 포함한다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 주석 촉매는 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다: 디-부틸 틴 디라우레이트, 디부틸비스(라우릴티오)스타네이트, 디부틸틴비스(이소옥틸머캅토 아세테이트), 디부틸틴비스(이소옥틸말리에이트), 틴 옥타노에이트, 및 이들 중 임의의 둘 이상의 혼합물.

[0104] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 촉매는 삼차 아민을 포함한다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 촉매는 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다: DABCO, 펜타메틸디프로필렌트리아민, 비스(디메틸아미노 에틸 에테르), 펜타메틸디에틸렌트리아민, DBU, 페놀 염, 디메틸사이클로헥실아민, 2,4,6-트리스(N,N-디메틸아미노메틸)페놀 (DMT-30), 1,3,5-트리스(3-디메틸아미노프로필)헥사하이드로-s-트리아진, 암모늄 염, 및 이들 중 임의의 조합물 또는 배합물.

[0105] 촉매의 전형적인 양은 B-사이드 혼합물 중의 총 폴리올의 100 중량부당 0.001 내지 10 부의 촉매이다. 특정한 구체예에서, 배합물에서 촉매 수준은, 사용될 때, B-사이드 혼합물에 존재하는 폴리올의 양을 기준으로 약 0.001 pph (중량 백분율) 내지 약 3 pph 범위이다. 특정한 구체예에서, 촉매 수준은 약 0.05 pph 내지 약 1 pph, 또는 약 0.1 pph 내지 약 0.5 pph 범위이다.

#### [0106] 발포제

[0107] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 조성물은 발포제를 포함한다. 발포제는 화학적 발포제(전형적으로 분자 A-사이드 성분과 반응하여 CO<sub>2</sub> 또는 다른 휘발성 화합물을 방출시키는 분자)일 수 있거나, 물리적 발포제(전형적으로 폼 형성 동안 기화하는 낮은 비점을 가지는 분자)일 수 있다. 여러 발포제가 당해 분야에 공지이고 종래의 방법에 따라 본 발명의 B-사이드 조성물에 적용될 수 있다. 발포제 및 첨가되는 양의 선택은 반복 실험의 문제일 수 있다.

[0108] 특정한 구체예에서, 발포제는 화학적 발포제를 포함한다. 특정한 구체예에서, 물은 발포제로서 존재한다. 물은 A-사이드 혼합물 중의 이소시아네이트의 일부와 반응하여 이산화 탄소 기체를 생성함에 의하여 발포제로서 기능한다. 유사하게, 포름산이 발포제로서 포함될 수 있다. 포름산은 이소시아네이트의 일부와 반응하여 이산화 탄소 및 일산화 탄소 기체를 생성함에 의하여 발포제로서 기능한다.

[0109] 특정한 구체예에서, 물은 B-사이드 조성물 중의 폴리올의 100 중량부당 0.5 내지 20 부의 양으로 존재한다. 특정한 구체예에서, 물은 B-사이드 조성물 중의 폴리올의 100 중량부당 약 1 내지 10 부, 약 2 내지 8 부, 또는

약 4 내지 6 부로 존재한다. 특정한 구체예에서, 2 부의 물, 1.5 부의 물, 또는 0.75 부의 물을 초과하지 않는 것이 유리하다. 특정한 구체예에서, 물이 부재하는 것이 유리하다.

[0110] 특정한 구체예에서, 포름산은 B-사이드 조성물 중의 폴리올의 100 중량부당 0.5 내지 20 부의 양으로 존재한다. 특정한 구체예에서, 포름산은 B-사이드 조성물 중의 폴리올의 100 중량부당 약 1 내지 10 부, 약 2 내지 8 부, 또는 약 4 내지 6 부로 존재한다.

[0111] 특정한 구체예에서, 물리적 발포제가 사용될 수 있다. 적절한 물리적 발포제는 탄화수소, 플루오린-포함 유기 분자, 탄화수소, 클로로카본, 아세톤, 메틸 포르메이트 및 이산화 탄소를 포함한다. 일부 구체예에서, 플루오린-포함 유기 분자는 퍼플루오린화 화합물, 클로로플루오로카본, 하이드로클로로플루오로카본, 및 하이드로플루오로카본을 포함한다. 적절한 하이드로플루오로알칸은 디플루오로메탄 (R-32), 1,1,1,2-테트라플루오로에탄 (R-134a), 1,1-디플루오로에탄 (R-152a), 디플루오로클로로에탄 (R-142b), 트리플루오로메탄 (R-23), 헵타플루오로프로판 (R-227a), 헥사플루오로프로판 (R136), 1,1,1-트리플루오로에탄 (R-133), 플루오로에탄 (R-161), 1,1,1,2,2-펜타플루오로프로판 (R-245fa), 펜타플루오로프로필렌 (R2125a), 1,1,1,3-테트라플루오로프로판, 테트라플루오로프로필렌 (R-2134a), 1,1,2,3,3-펜타플루오로프로판 및 1,1,1,3,3-펜타플루오로-*n*-부탄을 포함하는 C<sub>1-4</sub> 화합물이다.

[0112] 특정한 구체예에서, 하이드로플루오로카본 발포제가 B-사이드 혼합물에 존재할 때, 이는 테트라플루오로에탄 (R-134a), 펜타플루오로프로판 (R-245fa) 및 펜타플루오로부탄 (R-365)으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0113] 발포제로서 사용하기 위하여 적절한 탄화수소는 비할로젠화 탄화수소, 예컨대 부탄, 이소부탄, 2,3-디메틸부탄, *n*- 및 *i*-펜탄 이성질체, 헥산 이성질체, 헵탄 이성질체 및 사이클로펜탄, 사이클로헥산, 및 사이클로헵탄을 포함하는 사이클로알칸을 포함한다. 일부 구체예에서, 발포제로서 사용하기 위한 탄화수소는 사이클로펜탄, *n*-펜탄, 및 이소-펜탄을 포함한다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물은 테트라플루오로에탄(R-134a), 펜타플루오로프로판(R-245fa), 펜타플루오로부탄(R-365), 사이클로펜탄, *n*-펜탄, 및 이소-펜탄으로 이루어진 군으로부터 선택되는 물리적 발포제를 포함한다.

[0114] 물리적 발포제가 존재하는 특정한 구체예에서, 이는 B-사이드 조성물 중의 폴리올의 100 중량부당 약 1 내지 약 20 부의 양으로 사용된다. 특정한 구체예에서, 물리적 발포제는 B-사이드 조성물 중의 폴리올의 100 중량부당 2 내지 15 부, 또는 4 내지 10 부로 존재한다.

#### [0115] 반응성 소분자

[0116] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 조성물은 이소시아네이트에 대하여 반응성인 하나 이상의 소분자를 포함한다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 반응성 소분자는 알코올, 아민, 카복실산, 티올, 및 이들 중 임의의 둘 이상의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 관능기를 가지는 유기 분자를 포함한다. 일부 구체예에서, 비-중합체 소분자는 1,000 g/mol 미만, 또는 1,500 g/mol 미만의 분자량을 가진다.

[0117] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 조성물은 하나 이상의 알코올을 포함한다. 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물은 다가 알코올을 포함한다.

[0118] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 조성물에 포함된 반응성 소분자는 이가 알코올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 이가 알코올은 C<sub>2-40</sub> 디올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 이가 알코올은 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다: 1,2-에탄디올, 1,2-프로판디올, 1,3-프로판디올, 1,2-부탄디올, 1,3-부탄디올, 1,4-부탄디올, 1,5-펜탄디올, 2,2-디메틸프로판-1,3-디올, 2-부틸-2-에틸프로판-1,3-디올, 2-메틸-2,4-펜탄 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-사이클로펜탄디올, 1,2-사이클로헥산디올, 1,3-사이클로헥산디올, 1,4-사이클로헥산디올, 1,2-사이클로헥산디메탄올, 1,3-사이클로헥산디메탄올, 1,4-사이클로헥산디메탄올, 1,4-사이클로헥산디에탄올, 이소소르바이드, 글리세롤 모노에스테르, 글리세롤 모노에테르, 트리메틸올프로판 모노에스테르, 트리메틸올프로판 모노에테르, 펜타에리스리톨 디에스테르, 펜타에리스리톨 디에테르, 및 이들 중 어느 것의 알콕시화 유도체.

[0119] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 반응성 소분자는 디에틸렌 글리콜, 트리에틸렌 글리콜, 테트라에틸렌 글리콜, 고급 폴리(에틸렌 글리콜), 예컨대 220 내지 약 2000 g/mol의 수평균 분자량을 가지는 것, 디프로필렌 글리콜, 트리프로필렌 글리콜, 및 고급 폴리(프로필렌 글리콜) 예컨대 234 내지 약 2000 g/mol의 수평균 분자량을 가지는 것으로 이루어진 군으로부터 선택된 이가 알코올을 포함한다.

- [0120] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 반응성 소분자는 디에시드, 디올, 또는 하이드록시 산으로 이루어진 군으로부터 선택된 화합물의 알콕시화 유도체를 포함한다. 특정한 구체예에서, 알콕시화 유도체는 에톡시화 또는 프로폭시화 화합물을 포함한다.
- [0121] 특정한 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 반응성 소분자는 중합체 디올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 중합체 디올은 폴리에테르, 폴리에스테르, 하이드록시-종결된 폴리올레핀, 폴리에테르-코폴리에스테르, 폴리에테르 폴리카보네이트, 폴리카보네이트-코폴리에스테르, 및 이들 중 어느 것의 알콕시화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정한 구체예에서, 중합체 디올은 약 2000 g/mol 미만의 평균 분자량을 가진다.
- [0122] 일부 구체예에서, B-사이드 조성물에 포함된 반응성 소분자는 트리올 또는 고급 다가 알코올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 글리세롤, 1,2,4-부탄트리올, 2-(하이드록시메틸)-1,3-프로판디올; 헥산 트리올, 트리메틸올 프로판, 트리메틸올 에탄, 트리메틸올헥산, 1,4-사이클로헥산트리메탄올, 펜타에리스리톨 모노 에스테르, 펜타에리스리톨 모노 에테르, 및 이들 중 어느 것의 알콕시화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정한 구체예에서, 알콕시화 유도체는 에톡시화 또는 프로폭시화 화합물을 포함한다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 2 내지 12 탄소 원자, 바람직하게는 2 내지 8 탄소 원자를 가지는 것, 예컨대 에틸렌 글리콜, 디에틸렌 글리콜, 네오펜틸 글리콜, 부탄디올, 헥산디올 등, 및 이들의 혼합을 포함하는 폴리 알코올이다.
- [0123] 일부 구체예에서, 반응성 소분자는 넷 내지 여섯의 하이드록시 그룹을 가지는 다가 알코올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 디펜타에리트로톨 또는 이의 알콕시화 유사체를 포함한다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 소르비톨 또는 이의 알콕시화 유사체를 포함한다.
- [0124] 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 일반식  $(HO)_xQ(COOH)_y$ 를 가지는 하이드록시-카복실산을 포함하고, 여기서 Q는 1 내지 12 탄소 원자를 포함하는 직선 또는 분지형 탄화수소 라디칼이고,  $x$  및  $y$ 는 각각 1 내지 3의 정수이다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 디올 카복실산을 포함한다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 비스(하이드록실알킬) 알칸산을 포함한다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 비스(하이드록시메틸) 알칸산을 포함한다. 특정한 구체예에서 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 군으로부터 선택된다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 N,N-비스(2-하이드록시알킬)카복실산을 포함한다.
- [0125] 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 하나 이상의 아미노 그룹을 포함하는 다가 알코올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 아미노 디올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 삼차 아미노 그룹을 포함하는 디올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 아미노 디올은 디에탄올아민(DEA), N-메틸디에탄올아민(MDEA), N-에틸디에탄올아민(EDEA), N-부틸디에탄올아민(BDEA), N,N-비스(하이드록시에틸)- $\alpha$ -아미노 피리딘, 디프로판올아민, 디이소프로판올아민(DIPA), N-메틸디이소프로판올아민, 디이소프로판올-p-톨루이딘, N,N-비스(하이드록시에틸)-3-클로로아닐린, 3-디에틸아미노프로판-1,2-디올, 3-디메틸아미노프로판-1,2-디올 및 N-하이드록시에틸 피페리딘으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 사차 아미노 그룹을 포함하는 디올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 사차 아미노 그룹을 포함하는 반응성 소분자는 위에 기재된 아미노 알코올 중 어느 것의 산 염 또는 사차화 유도체이다.
- [0126] 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 약 2 이상의 일차 및/또는 이차 아민 그룹을 가지는 무기 또는 유기 폴리 아민, 폴리알코올, 우레아, 및 이들 중 임의의 둘 이상의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 디에틸렌 트리아민 (DETA), 에틸렌 디아민 (EDA), 메타-자일릴렌디아민 (MXDA), 아미노에틸 에탄올아민 (AEEA), 2-메틸 펜탄 디아민 등, 및 이들의 혼합으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 또한 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 일차 및/또는 이차 아민이 본 발명의 실시에서 적절하다. 특정한 구체예에서, 반응성 소분자는 하이드라진, 치환된 하이드라진, 하이드라진 반응 생성물 등, 및 이들의 혼합으로 이루어진 군으로부터 선택된다. 적절한 우레아는 우레아 및 이의 유도체 등, 그리고 이들의 혼합을 포함한다.
- [0127] 특정한 구체예에서, 최소 하나의 염기성 질소 원자를 포함하는 반응성 소분자가 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다: 모노-, 비스- 또는 폴리알콕시화 지방족, 사이클로지방족, 방향족 또는 헤테로사이클릭 일차 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, 에톡시화 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-디에톡실톨루이딘, N,N-디에톡실-1-아미노피리딘, N,N'-디에톡실 피페라진, 디메틸-비스-에톡실 하이드라진, N,N'-비스-(2-하이드록시에틸)-N,N'-디에틸헥사하이드로프-페닐렌디아민, N-12-하이드록시에틸 피페라진, 폴리알콕시화 아민, 프로콕시화 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-비스옥시에틸페닐티오세미카바자이드, N,N-비스-옥시에틸메틸 세미카바자이드, p,p'-비스-아미노메틸 디벤질 메틸아민, 2,6-디아미노피리딘, 2-디메틸아미노메틸-2-메틸프로판올, 3-디올. 특정한 구체예에서, 사슬-연장제는 둘의 아미노 그룹을 포함하는 화합물이다. 특정한 구체예에서, 사슬-연장제는 에틸렌 디아민, 1,6-헥사메틸렌 디아민, 및 1,5-디아미노-1-메틸-펜탄으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0128]

### 첨가제

[0129]

상기 성분 이외에도, 본 발명의 B-사이드 혼합물은 폴리우레탄 폼 기술 분야에 공지인 바와 같이 다양한 첨가제를 임의적으로 포함할 수 있다. 그러한 첨가제는 용매, 상용화제, 착색제, 계면활성제, 방염제, 대전방지 화합물, 향미생물제, UV 안정화제, 가소제, 및 기포 개방제를 포함할 수 있지만 이에 제한되지 않는다.

[0130]

### 용매

[0131]

바람직할 경우, 폴리우레탄 또는 예비-중합체가 (하기 참조) 물 또는 당업자에게 공지인 유기 용매를 포함할 수 있는 용매에 분산될 수 있다. 적절한 용매는 지방족, 방향족, 또는 할로젠화 탄화수소, 에테르, 폴리에테르 폴리올, 에스테르, 케톤, 락톤, 셀론, 니트릴, 아미드, 니트로메탄, 프로필렌 카보네이트, 디메틸 카보네이트 등을 포함할 수 있다. 대표적인 예가 아세톤, 아세토니트릴, 벤젠, 부탄올, 부틸 아세테이트, g-부티로락톤, 부틸 카리비톨 아세테이트, 카비톨 아세테이트, 클로로포름, 사이클로헥산, 1,2-디클로로메탄, 디베이지 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, 스타이렌, 알파-테르펜올, 테트라하이드라퓨란, 텍산올, 톨루엔, 디에틸 석시네이트, 디에틸렌 글리콜 메틸 에테르, 에틸렌 글리콜 디아세테이트, 트리에틸 포스페이트 등을 포함하지만 이에 제한되지 않는다.

[0132]

### 착색제

[0133]

특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 혼합물은 하나 이상의 적절한 착색제를 포함한다. 여러 폼 생성물이 제품 등급을 식별하거나, 황변을 숨기거나, 소비자 제품을 제조하기 위하여 제조 동안 색상 코드화된다. 역사적인 폼 착색 방법은 전통적인 안료 또는 염료에 블렌딩하는 것이었다. 전형적인 무기 착색제에는 이산화티타늄, 산화철 및 산화크롬이 포함되었다. 유기 안료는 아조/디아조 염료, 프탈로시아닌 및 디옥사진, 또한 카본 블랙으로부터 유래한다. 이들 착색제로써 직면하는 전통적인 문제점은 높은 점도, 마모 경향, 폼 불안정성, 폼 그을음 (scorch), 변색, 및 가용 색상의 제한된 범위를 포함한다. 폴리올-결합된 착색제의 개발에서 최근의 진전이 다 음에 기재된다:

[0134]

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.

[0135]

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.

[0136]

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

[0137]

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

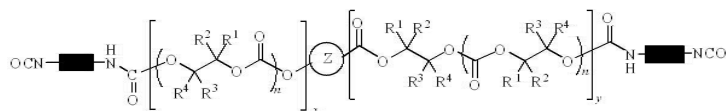
[0138]


### UV 안정화제

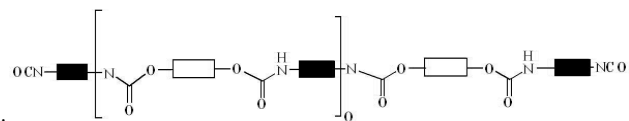
- [0139] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 혼합물은 하나 이상의 적절한 UV 안정화제를 포함한다. 방향족 이소시아네이트에 기초한 폴리우레탄은 전형적으로 빛에 노출되어 노화 시 어두운 색조의 황색으로 변할 것이다. 폴리우레탄 노후화(weathering) 현상의 검토가 Davis, A.; Sims, D. Weathering Of Polymers; Applied Science: London, 1983, 222-237에 제시된다. 황변은 대부분의 폼 적용물에서 문제가 아니다. 광 보호제, 예컨대 하이드록시벤조트리아졸, 징크 디부틸 티오카바메이트, 2,6-디터셔리 부틸카테콜, 하이드록시벤조페논, 입체장애(hindered) 아민, 및 포스파이트가 폴리우레탄의 광 안정성을 개선하기 위하여 사용되었다. 유색 안료도 또한 성공적으로 사용되었다.
- [0140] **방염제**
- [0141] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 혼합물은 하나 이상의 적절한 방염제를 포함한다. 저밀도, 기포-개방된 연질 폴리우레탄 폼은 큰 표면적 및 공기에 대한 고 투과성을 가지고 따라서 충분한 발화원 및 산소의 적용에서 연소할 것이다. 방염제가 흔히 이러한 인화성을 감소시키기 위하여 첨가된다. 임의의 특정한 폼을 위한 방염제의 선택은 흔히 폼의 의도된 사용 적용분야 및 그러한 적용분야를 좌우하는 부수적인 인화성 시험 시나리오에 따른다. 첨가제에 의하여 영향을 받을 수 있는 인화성의 양태는 초기 가연성, 연소 속도, 및 연기 발생을 포함한다.
- [0142] 가장 널리 사용되는 방염제는 염소화 포스페이트 에스테르, 염소화 파라핀, 및 멜라민 분말이다. 이들을 비롯하여 여러 다른 조성물이 특수 화학물질 공급자로부터 입수 가능하다. 이 주제에 대한 검토가 Kuryla, W. C.; Papa, A. J. Flame Retardancy of Polymeric Materials, Vol. 3; Marcel Dekker: New York, 1975, 1-133에 주어진다.
- [0143] **항미생물제**
- [0144] 특정한 온난 및 고습도의 조건하에, 폴리우레탄 폼은 미생물에 의하여 공격받기 쉽다. 이것이 우려될 때, 박테리아, 효모 또는 진균에 대항하는 첨가제가 제조 동안 폼에 첨가된다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 혼합물은 하나 이상의 적절한 정균제를 포함한다.
- [0145] **가소제**
- [0146] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 혼합물은 하나 이상의 적절한 가소제를 포함한다. 비반응성 액체는 개선된 가공을 위하여 폼을 연화하거나 점도를 감소시키기 위하여 사용되어 왔다. 연화 효과가 더 고도로 가교된 중합체 구조가 획득되도록 더 낮은 등중량의 폴리올을 이용하여 보상될 수 있다. 이들 물질은 폼 밀도를 증가시키고 흔히 물리적 특성에 부정적으로 영향을 미친다.
- [0147] **기포-개방제**
- [0148] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 혼합물은 하나 이상의 적절한 기포 개방제를 포함한다. 일부 폴리우레탄 폼에서 냉각 시 수축하지 않는 폼을 획득하기 위하여 기포-개방제를 첨가할 필요가 있다. 기포-개방 유발을 위한 공지 첨가제는 실리콘계 소포제, 왁스, 미세 분할된 고체, 액체 퍼플루오로탄소, 파라핀 오일, 장쇄 지방산, 및 고농도의 에틸렌 옥사이드를 사용하여 제조된 특정한 폴리에테르 폴리올을 포함한다.
- [0149] **대전방지제**
- [0150] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 혼합물은 하나 이상의 적절한 대전방지 화합물을 포함한다. 일부 연질 폼이 포장, 의류, 및 정전기 전하의 축적이 최소화되도록 폼의 전기적 저항을 최소화하는 것이 바람직한 다른 적용분야에서 사용된다. 이는 전통적으로 이온화 가능 금속 염, 카복실산 염, 포스페이트 에스테르, 및 이들의 혼합물의 첨가를 통하여 달성되었다. 이들 제제는 본질적으로 전도성임에 의하여 또는 공기로부터 수분을 흡수함에 의하여 기능한다. 원하는 순 결과는 폼 표면 반응성의 차수 감소이다.
- [0151] **상용화제**
- [0152] 특정한 구체예에서, 본 발명의 B-사이드 혼합물은 하나 이상의 적절한 상용화제를 포함한다. 상용화제는 둘 이상의 비혼화성 성분이 서로 합쳐 균일한 액체상을 제공하도록 하는 분자이다. 그러한 여러 분자가 폴리우레탄 산업에서 공지이고, 이들은 비제한적 예로서: 아마이드, 아민, 탄화수소 오일, 프탈레이트, 폴리부틸렌글리콜, 및 우레아를 포함한다.
- [0153] 특정한 구체예에서, 본 발명은 폴리우레탄 폼의 형성에 적절한 B-사이드 혼합물을 포함하고 여기서 B-사이드 혼

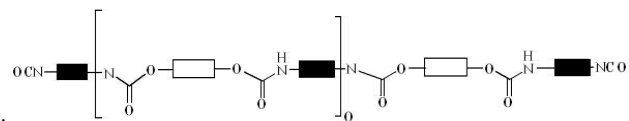
합물은 다음을 포함한다:

- [0154] 100 중량부의 폴리올을 성분, 여기서 폴리올을 성분은위에 그리고 본 명세서에서 특정한 구체예 및 실시예에 기재된 약 5 중량 퍼센트 내지 100 중량 퍼센트의 하나 이상의 APC 폴리올을 포함함;
- [0155] 위에 그리고 본 명세서에서 특정한 구체예 및 실시예에 기재된 바와 같은 0.01 내지 20 중량부의 하나 이상의 발포제;
- [0156] 위에 그리고 본 명세서에서 특정한 구체예 및 실시예에 기재된 바와 같은 0 내지 1 중량부의 하나 이상의 촉매;
- [0157] 0 내지 20 중량부의 하나 이상의 반응성 소분자, 여기서 반응성 소분자는 실질적으로 위에 그리고 본 명세서에서 특정한 구체예 및 실시예에 기재된 바와 같음; 및
- [0158] 0 내지 10 중량부의 하나 이상의 첨가제, 여기서 첨가제는 실질적으로 위에 그리고 본 명세서에서 특정한 구체예에 기재된 바와 같은 상용화제, 착색제, 방염제, 대전방지제, 항미생물제, UV 안정화제, 가소제, 및 기포 방제로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0159] **예비-중합체**
- [0160] 일부 구체예에서, 본 발명의 방법은 본 명세서에 기재된 APC 폴리올의 예비중합체의 형성을 이용한다. 이는 -OH 또는 이소시아네이트-종결된 예비중합체를 생성할 수 있다. -OH 종결된 예비중합체의 경우에, 이들 물질은 본 명세서에 기재된 방법에서 B-사이드 중의 APC 폴리올의 일부 또는 전부를 대신하여 사용될 수 있다.
- [0161] 이소시아네이트-종결된 예비중합체의 경우에, APC는 A-사이드 조성물의 일부로서 제공될 수 있다. 특정한 구체예에서, 그러한 예비중합체-포함 A-사이드 조성물은 고온에서 또는 이에 용해된 CO<sub>2</sub>와 함께 제공되어 APC 폴리올이 B-사이드 조성물 중에 있을 때 위에 기재된 것과 유사한 장점을 제공한다.
- [0162] 본 발명의 이러한 구체예를 실시하기에 적절한 예비중합체 조성물 제조 방법이 WO/2013158621에 기재되고, 이의 전체는 본 명세서에 참조로 포함된다.
- [0163] 특정한 구체예에서, 그러한 이소시아네이트-종결된 예비중합체는 소중합이 거의 없는 폴리이소시아네이트 화합물과의 반응에 의하여 말단-캡핑된 에폭사이드-CO<sub>2</sub>-유도된 폴리올로 주로 이루어진다. 특정한 구체예에서, 그러한 이소시아네이트-종결된 예비중합체는 폴리이소시아네이트 화합물과의 반응에 의하여 형성된 우레탄 결합을 통하여 연결된 복수의 에폭사이드-CO<sub>2</sub>-유도된 폴리올 세그먼트를 포함한다.
- [0164] 특정한 구체예에서, 본 발명의 방법에 적절한 예비중합체는 하나 이상의 위에 기재된 APC 폴리올과 화학량론적 과량의 본 명세서에 기재된 디이소시아네이트 중 임의의 하나 이상 사이의 반응의 결과이다. 이들 예비중합체의 중합도(즉 예비중합체 사슬에 포함된 폴리올 세그먼트의 평균 수)가 이소시아네이트의 상대적 양, 또한 시약 첨가 순서 및 반응 조건을 제어하여 조작될 수 있다.
- [0165] 특정한 구체예에서, 예비중합체는 다음 화학식에 일치하는 화합물을 포함한다:



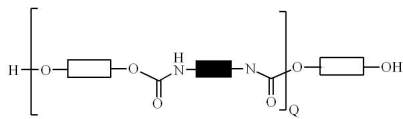
- [0166] , 여기서, 흑색 직사각형 ■는 디이소시아네이트(예를 들어 이소시아네이트가 2,4-톨루엔 디이소시아네이트일 경우, ■가 화학식 을 가질 것임)의 탄소 뼈대를 나타내고, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, R<sup>3</sup>, R<sup>4</sup>, n, x, 및 y는 위에 그리고 본 명세서에 클래스 및 서브클래스에 정의된 바와 같다.



- [0167] 특정한 구체예에서, 예비중합체는 화학식: 와 일치하는 화합물을 포함하고, 여기서 Q는 0 또는 1 내지 약 50의 정수이고, 각각의 열린 직사각형 □은 각각 동일하거나 상이할 수 있는 폴리올 모이어티를 나타내고, ■는, 위에 그리고 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에

$$\left[ \text{OCN}-\text{[Ring]}-\text{N}\left(\text{C}(=\text{O})\text{O}\text{C}(\text{R}^1)(\text{R}^2)\text{C}(\text{R}^3)(\text{R}^4)\text{C}(=\text{O})\text{O}\right)_n-\text{O}-\text{[Z]}-\text{O}-\text{C}(=\text{O})\text{O}\text{C}(\text{R}^1)(\text{R}^2)\text{C}(\text{R}^3)(\text{R}^4)\text{C}(=\text{O})\text{O}\right]_Q-\text{N}\left(\text{C}(=\text{O})\text{O}\text{C}(\text{R}^1)(\text{R}^2)\text{C}(\text{R}^3)(\text{R}^4)\text{C}(=\text{O})\text{O}\right)_n-\text{H}-\text{[Ring]}-\text{NC O}$$

다른 구체예에서, 예비중합체는 화학량론적 과량의 폴리올을 제한된 양의 이소시아네이트와 반응시켜 형성될 수 있다. 그러한 구체예에서, 예비중합체는 -OH 말단 그룹을 가지고, 우레탄 연결에 의하여 연결된 둘 이상의 폴리올 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 그러한 예비중합체는 다음 구조에 일치한다:


$$\left[ \text{H} - \left( \text{O} - \text{C}(\text{R}^1)(\text{R}^2) - \text{C}(\text{R}^3)(\text{R}^4) - \text{O} - \text{C}(=\text{O}) - \text{O} - \text{Z} - \text{O} - \text{C}(=\text{O}) - \text{O} - \text{C}(\text{R}^5)(\text{R}^6) - \text{C}(\text{R}^7)(\text{R}^8) - \text{O} - \text{C}(=\text{O}) - \text{O} - \text{H} \right)_n \right]_m$$

서,  $\square$ ,  $\blacksquare$ ,  $\bigcirc$ ,  $Q$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ ,  $n$ ,  $x$ , 및  $y$ 는 위에 그리고 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 정의된 바와 같다.

이 섹션은 본 발명의 방법 및 조성물에서 유용성을 가지는 APC 폴리올 중 일부를 설명한다. 본 명세서에 언급된 APC 폴리올은 하나 이상의 에폭사이드 및 이산화 탄소의 공중합으로부터 유도된다. 적절한 폴리올의 예, 또한 이들의 제조 방법이 PCT 공보 W02010/028362에 개시되고, 이들의 전체가 본 명세서에 참조로 포함된다.

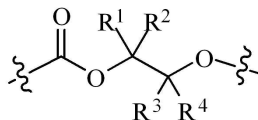
폴리를 조성물의 -OH 말단-그룹 함량을 표현하는 또 다른 방식은 당해 분야에 공지인 방법을 이용하여 측정된 OH# 기록에 의한 것이다. 특정한 구체예에서, 본 발명에서 사용된 APC 폴리올은 약 40 초과 OH#를 가진다. 특



정한 구체예에서, APC 폴리올은 약 50 초과, 약 75 초과, 약 100 초과, 또는 약 120 초과 OH#를 가진다.

[0180] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 조성물이 상당한 비율의 일차 하이드록실 말단 그룹을 가지는 것이 유리하다. 폴리(에틸렌 카보네이트)를 포함하는 조성물에 대하여 기준이 존재하지만, 치환된 에폭사이드의 공중합으로부터 유도된 폴리올에 대하여, 일부 또는 대부분의 사슬 말단이 이차 하이드록실 그룹인 -OH 그룹을 가지는 것이 통상적이다. 폴리(프로필렌 카보네이트) 폴리올은 대부분 이차 하이드록실 말단 그룹인 하이드록실 말단 그룹을 포함하는 폴리올의 한 예이다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 일차 -OH 말단 그룹의 비율을 증가시키도록 처리된다. 이는 당해 분야에 공지인 방법에 의하여, 예컨대 이차 하이드록실 그룹을 에틸렌 옥사이드, 반응성 락톤 등과 같은 시약과 반응시켜 달성될 수 있다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 일차 하이드록실 말단 그룹을 도입하기 위하여 베타 락톤, 카프로락톤 등으로 처리된다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 일차 하이드록실 말단 그룹을 도입하기 위하여 에틸렌 옥사이드로 처리된다.

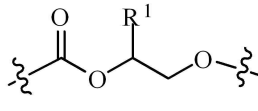
[0181] 특정한 구체예에서, 본 발명에 대한 유용성을 가지는 폴리카보네이트 폴리올이 다음 구조를 가지는 일차 반복 단위를 포함한다:



[0182] ,

[0183] 여기서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ , 및  $R^4$ 는, 중합체 사슬에서 각각의 존재에서, -H, 플루오린, 임의적으로 치환된  $C_{1-40}$  지방족 그룹, 임의적으로 치환된  $C_{1-20}$  헤테로지방족 그룹, 및 임의적으로 치환된 아릴 그룹으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ , 및  $R^4$  중 임의의 둘 이상은 임의적으로 개재하는 원자와 서로 합쳐져 임의적으로 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 하나 이상의 임의적으로 치환된 고리를 형성할 수 있다.

[0184] 특정한 구체예에서, 본 발명에 대한 유용성을 가지는 폴리카보네이트 폴리올이 다음 구조를 가지는 일차 반복 단위를 포함한다:



[0185] ,

[0186] 여기서  $R^1$ 은 위에서 그리고 본 명세서에서 클래스, 서브클래스 및 실시예에서 정의된 바와 같다.

[0187] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 이산화 탄소 및 에틸렌 옥사이드의 공중합체를 포함한다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 이산화 탄소 및 프로필렌 옥사이드의 공중합체를 포함한다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 이산화 탄소 및 사이클로헥센 옥사이드의 공중합체를 포함한다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 이산화 탄소 및 사이클로펜텐 옥사이드의 공중합체를 포함한다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 이산화 탄소 및 3-비닐 사이클로헥산 옥사이드의 공중합체를 포함한다.

[0188] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 프로필렌 옥사이드, 1,2-부텐 옥사이드, 2,3-부텐 옥사이드, 사이클로헥센 옥사이드, 3-비닐 사이클로헥센 옥사이드, 에피클로로하이드린, 글리시딜 에스테르, 글리시딜 에테르, 스타이렌 옥사이드, 및 고급 알파 올레핀의 에폭사이드로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 추가적인 에폭사이드와 함께 이산화 탄소 및 에틸렌 옥사이드의 삼원중합체를 포함한다. 특정한 구체예에서, 그러한 삼원중합체는 에틸렌 옥사이드로부터 유도된 다수의 반복 단위와 함께 더 적은 양의 하나 이상의 추가적인 에폭사이드로부터 유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 약 50% 내지 약 99.5% 에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 약 60% 초과 에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 75% 초과 에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 80% 초과 에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 85% 초과 에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 90% 초과 에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 95% 초과 에틸렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다.

[0189] 일부 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 이산화 탄소 및 프로필렌 옥사이드의 공중합체와 함께 에틸렌 옥사이드, 1,2-부텐 옥사이드, 2,3-부텐 옥사이드, 사이클로헥센 옥사이드, 3-비닐 사이클로헥센 옥사이드, 에피클로로하

이드린, 글리시딜 에스테르, 글리시딜 에테르, 스타이렌 옥사이드, 및 고급 알파 올레핀의 에폭사이드로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 추가적인 에폭사이드를 포함한다. 특정한 구체예에서, 그러한 삼원중합체는 프로필렌 옥사이드로부터 유도된 다수의 반복 단위와 함께 더 적은 양의 하나 이상의 추가적인 에폭사이드로부터 유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 약 50% 내지 약 99.5% 프로필렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 60% 초과인 프로필렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 75% 초과인 프로필렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 80% 초과인 프로필렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 85% 초과인 프로필렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 90% 초과인 프로필렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다. 특정한 구체예에서, 삼원중합체는 95% 초과인 프로필렌 옥사이드-유도된 반복 단위를 포함한다.

[0190] 특정한 구체예에서, 본 발명에서 유용성을 가지는 APC 폴리올 조성물은 약 500 g/mol 내지 약 25,000 g/mol 범위의 수평균 분자량( $M_n$ )을 가진다.

[0191] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 25,000 g/mol 미만의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 10,000 g/mol 미만의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 5,000 g/mol 미만의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 500 g/mol 내지 약 15,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 500 g/mol 내지 약 10,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 500 g/mol 내지 약 5,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 사슬 폴리올은 약 500 g/mol 내지 약 3,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 500 g/mol 내지 약 2,500 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 500 g/mol 내지 약 2,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 500 g/mol 내지 약 1,500 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 500 g/mol 내지 약 1,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 1,000 g/mol 내지 약 5,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 1,000 g/mol 내지 약 3,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 5,000 g/mol 내지 약 10,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 5,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 4,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 3,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 2,500 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 2,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 1,500 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 1,000 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 850 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 750 g/mol의  $M_n$ 을 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 약 500 g/mol의  $M_n$ 을 가진다.

[0192] 특정한 구체예에서, 사용된 APC 폴리올은 좁은 분자량 분포를 가짐을 특징으로 한다. 이는 APC 폴리올 중합체의 다분산지수(PDI)에 의하여 명시될 수 있다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 조성물은 2 미만의 PDI를 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 조성물은 1.8 미만의 PDI를 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 조성물은 1.5 미만의 PDI를 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 조성물은 1.4 미만의 PDI를 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 조성물은 약 1.0 내지 1.2의 PDI를 가진다. 특정한 구체예에서, APC 폴리올 조성물은 약 1.0 내지 1.1의 PDI를 가진다.

[0193] 특정한 구체예에서 본 발명의 APC 폴리올 조성물은 높은 퍼센티지의 보네이트 연결 및 낮은 함량의 에테르 연결을 포함하는 실질적으로 교호하는 중합체를 포함한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 85% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 90% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 91% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 92% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 93% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본

발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 94% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 95% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 96% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 97% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 98% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 99% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여 조성물 중에서, 카보네이트 연결의 퍼센티지가 99.5% 이상임을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 상기 퍼센티지는 중합 개시제 또는 사슬전달제에 존재하는 에테르 연결을 배제하고, 에폭사이드 CO<sub>2</sub> 공중합 동안 형성되는 연결만을 지칭한다.

[0194] 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은 에폭사이드 CO<sub>2</sub> 공중합으로부터 유도된 중합체 사슬 내에 또는 중합체에 존재할 수 있는 임의의 중합 개시제, 사슬전달제 또는 말단 그룹 내에 본질적으로 에테르 연결을 포함하지 않음을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은, 평균하여, 조성물 내의 중합체 사슬당 하나 미만의 에테르 연결을 포함함을 특징으로 한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올 조성물은 본질적으로 에테르 연결을 포함하지 않음을 특징으로 한다.

[0195] APC 폴리올이 (예를 들어 프로필렌 옥사이드, 1,2-부틸렌 옥사이드, 에피클로로하이드린, 에폭시화 알콜올레핀, 또는 글리시돌 유도체와 같은) 일치환된 에폭사이드로부터 유도되는 특정한 구체예에서, APC는 위치규칙적(regioregular)임을 특징으로 한다. 위치규칙성(regioregularity)은 중합체 사슬 내에 헤드-투-테일 배열로 배향된 인접한 단량체 단위의 퍼센티지로서 표현될 수 있다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 APC 폴리올 사슬은 약 80%보다 높은 헤드-투-테일 함량을 가진다. 특정한 구체예에서, 헤드-투-테일 함량은 약 85%보다 높다. 특정한 구체예에서, 헤드-투-테일 함량은 약 90%보다 높다. 특정한 구체예에서, 헤드-투-테일 함량은 약 91% 초과, 약 92% 초과, 약 93% 초과, 약 94% 초과, 또는 약 95% 초과이다. 특정한 구체예에서, 중합체의 헤드-투-테일 함량은 양성자 또는 탄소-13 NMR 분광법에 의하여 결정되는 바와 같다.

[0196] 특정한 구체예에서, 본 발명에 유용한 APC 폴리올은 특정 범위 내에서 제어될 점도를 가진다. 바람직한 범위는 특정 적용분야에 따를 수 있고, 특정 적용분야에 대한 일반적 범위 내에서 조절되어야 할 수 있다.

[0197] APC 폴리올이 경질 폼의 배합물 또는 열가소성 조성물에서 사용되는 특정한 구체예에서, 폴리올은 최소 20 °C 그러나 70 °C 미만의 온도에서 측정된, 약 30,000 cps 미만의 점도를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 20,000 cps 미만, 약 15,000 cps 미만, 약 12,000 cps 미만, 또는 약 10,000 cps 미만의 점도를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 600 내지 약 30,000 cps의 점도를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 2,000 내지 약 20,000 cps의 점도를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 5,000 내지 약 15,000 cps의 점도를 가진다.

[0198] 다른 구체예에서, APC 폴리올이 연질 폼의 배합물에서 사용되는 경우, 폴리올은 최소 20 °C 그러나 70 °C 미만의 온도에서 측정된, 약 10,000 cps 미만의 점도를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 8,000 cps 미만, 약 6,000 cps 미만, 약 3,000 cps 미만, 또는 약 2,000 cps 미만의 점도를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 1,000 내지 약 10,000 cps의 점도를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 1,000 내지 약 6,000 cps의 점도를 가진다.

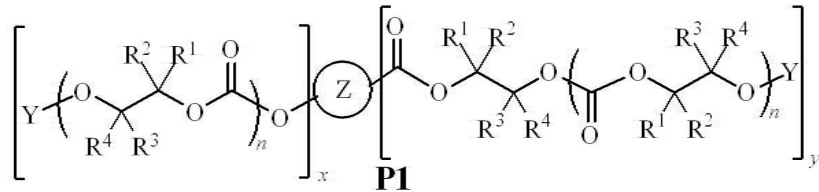
[0199] 특정한 구체예에서, 상기 기재된 폴리올 점도 값은 약 25 °C에서 측정된 점도를 나타낸다. 특정한 구체예에서, 상기 점도 값은 약 30 °C, 약 40 °C, 약 50 °C, 약 60 °C, 또는 약 70 °C에서 측정된 점도를 나타낸다.

[0200] 특정한 구체예에서, 본 발명에서 유용한 APC 폴리올은 특정 범위 내의 Tg를 가진다. 원하는 Tg는 적용분야에 따라 변할 것이고, 특정 적용분야에 대한 일반적 범위 내에서 조절되어야 할 수 있다. 특정한 구체예에서, 폴리올이 연질 폼 조성물의 배합물에서 사용되는 경우에, 폴리올은 약 20 °C 미만의 Tg를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 15 °C 미만, 약 10 °C 미만, 약 5 °C 미만, 약 0 °C 미만, 약 -10 °C 미만, 약 -20 °C 미만, 또는 약 -40 °C 미만의 Tg를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 -30 °C 내지 약 -20 °C의 Tg를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 -30 °C 내지 약 -20 °C의 Tg를 가진다.

[0201] 특정한 구체예에서, APC 폴리올이 경질 폼 조성물의 배합물에서 사용되는 경우에, 폴리올은 약 -30 °C 초과와 Tg를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 -20 °C 초과, 약 -10 °C 초과, 약 0 °C 초과, 약 10 °C

초과, 약 15 °C 초과, 또는 약 25 °C 초과, Tg를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 -10 °C 내지 약 30 °C의 Tg를 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리올은 약 0 °C 내지 약 20 °C의 Tg를 가진다.

특정한 구체예에서, 본 발명의 조성물은 구조 **P1**을 가지는 APC 폴리올을 포함한다:



여기서,

$R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ , 및  $R^4$ 는, 중합체 사슬에서 각각의 존재에서, -H, 플루오린, 임의적으로 치환된  $C_{1-30}$  지방족 그룹, 임의적으로 치환된  $C_{1-20}$  헤테로지방족 그룹, 및 임의적으로 치환된  $C_{6-10}$  아릴 그룹으로 이루어진 군으로부터 독립적으로 선택되고, 여기서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ , 및  $R^4$  중 임의의 둘 이상은 임의적으로 개재하는 원자와 서로 합쳐져 임의적으로 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 하나 이상의 임의적으로 치환된 고리를 형성할 수 있고;

$Y$ 는, 각각의 존재에서, 독립적으로 -H 또는 위에 기재된 것과 같은 또 다른 반응성 말단 그룹을 포함하는 모이머티의 부착 자리이고;

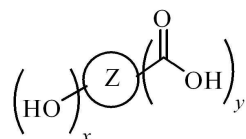
$n$ 은 각각의 존재에서, 독립적으로 약 2 내지 약 100의 정수이고;

$Z$ 는 다가 모이머티이고; 그리고

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

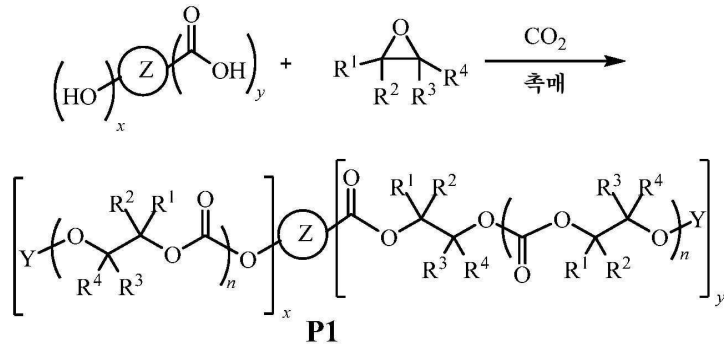
특정한 구체예에서, APC 사슬 내에 함입된 다가 모이머티  $Z$ 는 에폭사이드/ $CO_2$  공중합이 일어날 수 있는 둘 이상의 자리를 가지는 다관능성 사슬전달제로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, 그러한 공중합은 PCT 공보 W0/2010/028362에 예시된 바와 같은 다관능성 사슬전달제의 존재에서 수행된다.

특정한 구체예에서, 다관능성 사슬전달제는 다음 화학식을 가진다:



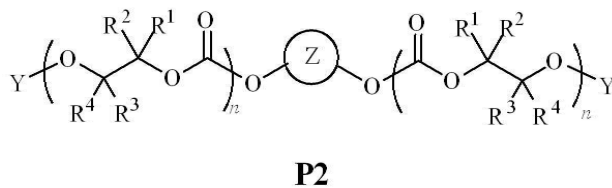
여기서  $Z$ ,  $x$ , 및  $y$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 APC 폴리올 사슬은 도식 2에 나타나는 바와 같이 그러한 다관능성 사슬전달제의 존재에서 하나 이상의 에폭사이드와 이산화 탄소의 공중합으로부터 유도된다:



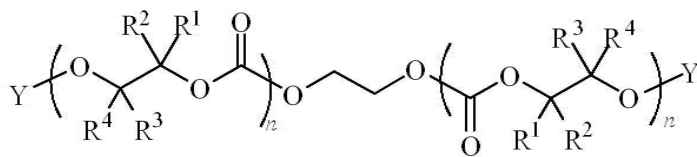
도식 2

특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 APC 폴리올 사슬은 구조 **P2**를 가지는 사슬을 포함한다:



여기서  $\text{R}^1$ ,  $\text{R}^2$ ,  $\text{R}^3$ ,  $\text{R}^4$ , Y,  $\text{Z}$  및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

APC 사슬이 구조 **P2**를 가지는 특정한 구체예에서,  $\text{Z}$ 는 이가 알코올로부터 유도된다. 그러한 사례에서  $\text{Z}$ 는 이가 알코올의 탄소-포함 뼈대를 나타내는 한편,  $\text{Z}$ 에 인접한 두 산소 원자가 디올의 -OH 그룹으로부터 유도된다. 예를 들어, 다관능성 사슬전달체가 에틸렌 글리콜일 경우,  $\text{Z}$ 는  $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 일 것이고 **P2**는 다음 구조를 가질 것이다:



이것이 본 명세서에 기재된 다른 다관능성 사슬전달체에 대한 경우임이 당업자에게 명백할 것이다. 즉, 사용된 사슬전달체의 구조와 결과적으로 생성된 폴리올 중의  $\text{Z}$ 의 구조 사이에 결합이 존재한다.

$\text{Z}$ 가 이가 알코올로부터 유도되는 특정한 구체예에서, 이가 알코올은  $\text{C}_{2-40}$  디올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 이가 알코올은 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다: 1,2-에탄디올, 1,2-프로판디올, 1,3-프로판디올, 1,2-부탄디올, 1,3-부탄디올, 1,4-부탄디올, 1,5-펜탄디올, 2,2-디메틸프로판-1,3-디올, 2-부틸-2-에틸프로판-1,3-디올, 2-메틸-2,4-펜탄 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-사이클로펜탄디올, 1,2-사이클로헥산디올, 1,3-사이클로헥산디올, 1,4-사이클로헥산디올, 1,2-사이클로헥산디메탄올, 1,3-사이클로헥산디메탄올, 1,4-사이클로헥산디메탄올, 1,4-사이클로헥산디에탄올, 이소소르바이드, 글리세롤 모노에스테르, 글리세롤 모노에테르, 트리메틸올프로판 모노에스테르, 트리메틸올프로판 모노에테르, 펜타에리스리톨 디에스테르, 펜타에리스리톨 디에테르, 및 이들 중 어느 것의 알콕시화 유도체.



[0224]

특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  가 이가 알코올로부터 유도되는 경우에, 이가 알코올은 예컨대 220 내지 약 2000 g/mol의 수평균 분자량을 가지는 것, 디프로필렌 글리콜, 트리프로필렌 글리콜, 및 고급 폴리(프로필렌 글리콜) 예컨대 234 내지 약 2000 g/mol의 수평균 분자량을 가지는 것으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0225]

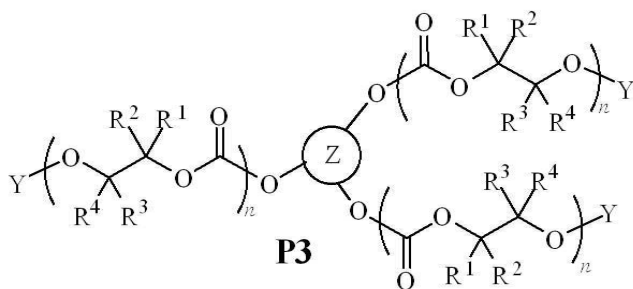
$\textcircled{Z}$  가 이가 알코올로부터 유도되는 특정한 구체예에서, 이가 알코올은 디에시드, 디올, 또는 하이드록시 산으로 이루어진 군으로부터 선택되는 화합물의 알콕시화 유도체를 포함한다. 특정한 구체예에서, 알콕시화 유도체는 에톡시화 또는 프로폭시화 화합물을 포함한다.

[0226]

$\textcircled{Z}$  가 이가 알코올로부터 유도되는 특정한 구체예에서, 이가 알코올은 중합체 디올을 포함한다. 특정한 구체예에서, 중합체 디올은 폴리에테르, 폴리에스테르, 하이드록시-중결된 폴리올레핀, 디올 및 포스젠 (또는 이의 반응성 균등물)로부터 유도된 폴리카보네이트 폴리올; 폴리에테르-코폴리에스테르, 폴리에테르 폴리카보네이트, 폴리카보네이트-코폴리에스테르, 폴리옥시메틸렌 중합체, 및 이들 중 어느 것의 알콕시화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정한 구체예에서, 중합체 디올은 약 2000 g/mol 미만의 평균 분자량을 가진다.

[0227]

특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  는 둘 초과와 하이드록시 그룹을 가지는 다가 알코올로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 APC 중합체 사슬은 모이여터  $\textcircled{Z}$  가 트리올로부터 유도된 APC 사슬을 포함한다. 특정한 구체예에서, 그러한 APC 사슬은 구조 **P3**을 가진다:



[0228]

[0229]

여기서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ , Y,  $\textcircled{Z}$  및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

[0230]

$\textcircled{Z}$  가 트리올로부터 유도되는 특정한 구체예에서, 트리올은: 글리세롤, 1,2,4-부탄트리올, 2-(하이드록시메틸)-1,3-프로판디올; 헥산 트리올, 트리메틸올 프로판, 트리메틸올 에탄, 트리메틸올헥산, 1,4-사이클로헥산트리메탄올, 펜타에리스리톨 모노 에스테르, 펜타에리스리톨 모노 에테르, 및 이들 중 어느 것의 알콕시화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정한 구체예에서, 알콕시화 유도체는 에톡시화 또는 프로폭시화 화합물을 포함한다.

[0231]

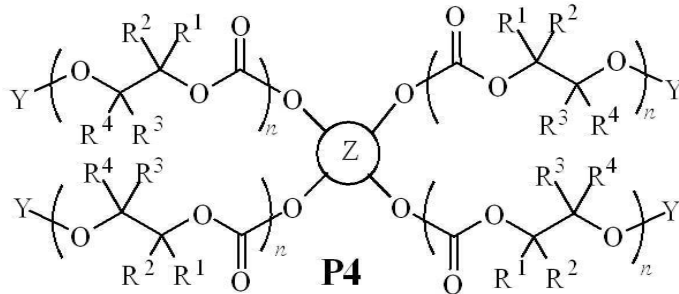
특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  는 삼관능성 카복실산 또는 삼관능성 하이드록시 산의 알콕시화 유도체로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, 알콕시화 유도체는 에톡시화 또는 프로폭시화 화합물을 포함한다.

[0232]

특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  가 중합체 트리올로부터 유도되는 경우에, 중합체 트리올은 폴리에테르, 폴리에스테르, 하이드록시-중결된 폴리올레핀, 폴리에테르-코폴리에스테르, 폴리에테르 폴리카보네이트, 폴리옥시메틸렌 중합체, 폴리카보네이트-코폴리에스테르, 및 이들 중 어느 것의 알콕시화 유사체로 이루어진 군으로부터 선택된다. 특정한 구체예에서, 알콕시화 중합체 트리올은 에톡시화 또는 프로폭시화 화합물을 포함한다.

[0233]

특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  는 넷의 하이드록시 그룹을 가지는 다가 알코올로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 APC 사슬은 모이어티  $\textcircled{Z}$  가 테트라올로부터 유도된 APC 사슬을 포함한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 APC 사슬은 구조 **P4**를 가지는 사슬을 포함한다:



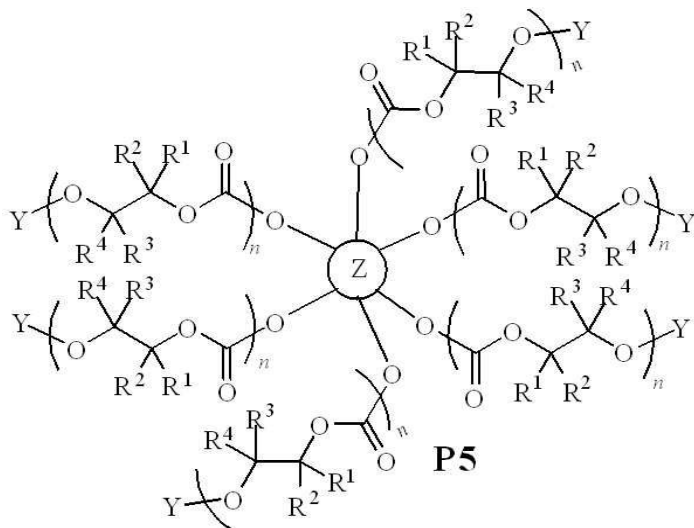
[0234]

[0235]

여기서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ , Y,  $\textcircled{Z}$  및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

[0236]

특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  는 넷 초과인 하이드록시 그룹을 가지는 다가 알코올로부터 유도된다. 특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  는 여섯의 하이드록시 그룹을 가지는 다가 알코올로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, 다가 알코올은 디펜타에리트로톨 또는 이의 알콕시화 유사체이다. 특정한 구체예에서, 다가 알코올은 소르비톨 또는 이의 알콕시화 유사체이다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 APC 폴리올 사슬은 구조 **P5**를 가지는 사슬을 포함한다:



[0237]

[0238]

여기서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ , Y,  $\textcircled{Z}$  및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

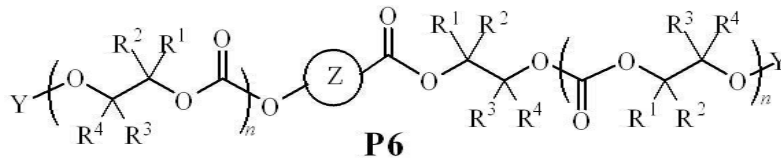
[0239]

특정한 구체예에서, 본 발명의 APC 폴리올은 이관능성 사슬(예를 들어 화학식 **P2**의 폴리카보네이트)의 조합을 고급 관능성 사슬(예를 들어 화학식 **P3** 내지 **P5**의 하나 이상의 폴리카보네이트)과 조합으로 포함한다.

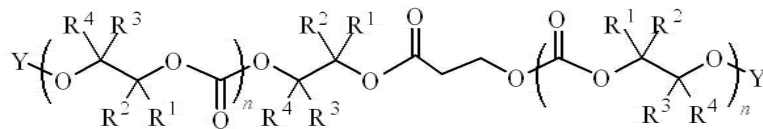
[0240]

특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  는 하이드록시 산으로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중

의 APC 폴리올 사슬은 구조 **P6**을 가지는 사슬을 포함한다:



여기서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,  $R^4$ , Y,  $\textcircled{Z}$  및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다. 그러한 사례에서,  $\textcircled{Z}$ 는 하이드록시 산의 탄소-포함 뼈대를 나타내는 한편,  $\textcircled{Z}$ 에 인접한 에스테르 및 카보네이트 연결은 하이드록시 산의  $-\text{CO}_2\text{H}$  그룹 및 하이드록시 그룹으로부터 유도된다. 예를 들어,  $\textcircled{Z}$ 가 3-하이드록시 프로판산으로부터 유도될 경우,  $\textcircled{Z}$ 는  $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 일 것이고 **P6**은 다음 구조를 가질 것이다:



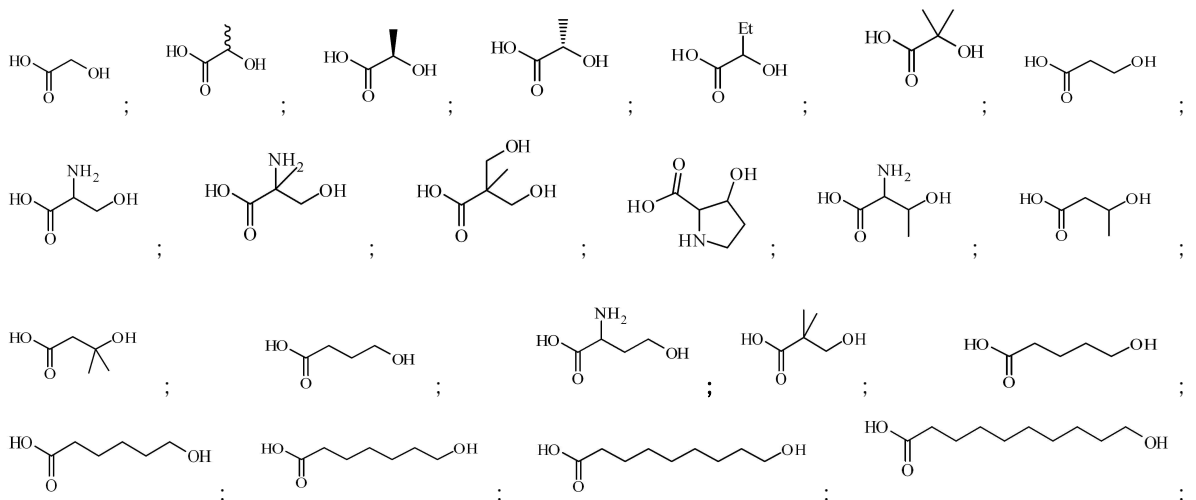
특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$ 는 임의적으로 치환된  $\text{C}_{2-40}$  하이드록시 산으로부터 유도된다. 특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$ 는 폴리에스테르로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, 그러한 폴리에스테르는 약 2000 g/mol 미만의 분자량을 가진다.

특정한 구체예에서, 하이드록시 산은 알파-하이드록시 산이다. 특정한 구체예에서, 하이드록시 산은 글리콜산, DL-락트산, D-락트산, L-락트산, 시트르산, 및 만델산으로 이루어진 군으로부터 선택된다.

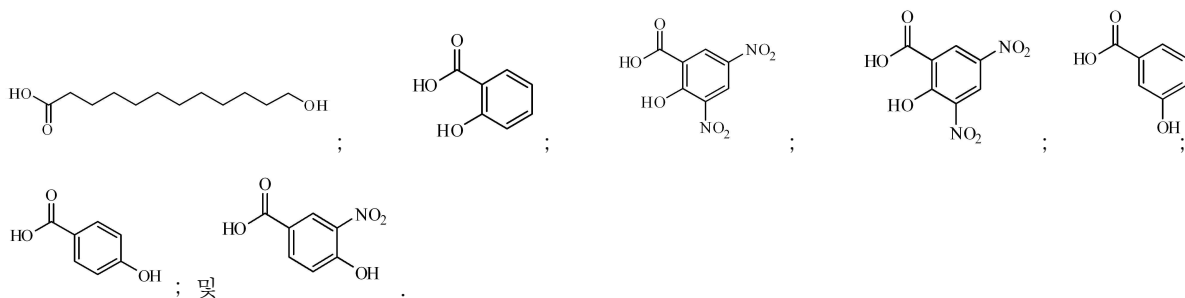
특정한 구체예에서, 하이드록시 산은 베타-하이드록시 산이다. 특정한 구체예에서, 하이드록시 산은 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다: 3-하이드록시프로피온산, DL 3-하이드록시부티르산, D-3 하이드록시부티르산, L-3-하이드록시부티르산, DL-3-하이드록시 발레르산, D-3-하이드록시 발레르산, L-3-하이드록시 발레르산, 살리실산, 및 살리실산의 유도체.

특정한 구체예에서, 하이드록시 산은  $\alpha-\omega$  하이드록시 산이다. 특정한 구체예에서, 하이드록시 산은 임의적으로 치환된  $\text{C}_{3-20}$  지방족  $\alpha-\omega$  하이드록시 산 및 소중함체 에스테르로 이루어진 군으로부터 선택된다.

특정한 구체예에서, 하이드록시 산은 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

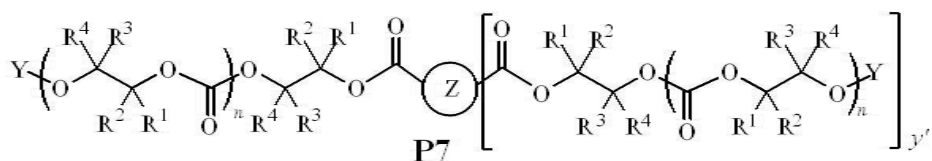






[0250]

특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  은 폴리카복실산으로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 APC 폴리올 사슬은 구조 **P7**을 가지는 사슬을 포함한다:



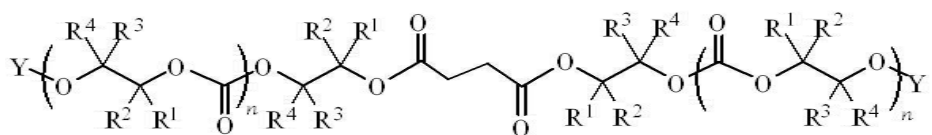
[0251]

여기서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,

$R^4$ , Y,  $\textcircled{Z}$  및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같고,  $y'$ 은 1 내지 5의 정수이다.

[0252]

APC 폴리올 사슬이 구조 **P7**을 가지는 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  는 폴리카복실산의 탄소-포함 뼈대(또는 옥살산의 경우에 공유 결합)를 나타내는 한편,  $\textcircled{Z}$  에 인접한 에스테르 그룹은 폴리카복실산의  $-\text{CO}_2\text{H}$  그룹으로부터 유도된다. 예를 들어,  $\textcircled{Z}$  가 석신산 ( $\text{HO}_2\text{CCH}_2\text{CH}_2\text{CO}_2\text{H}$ )으로부터 유도될 경우,  $\textcircled{Z}$  는  $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ 일 것이고 **P7**는 다음 구조를 가질 것이다:



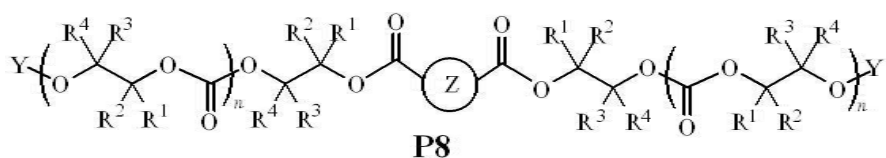
[0253]

여기서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,

$R^4$ , Y, 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

[0254]

특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  는 디카복실산으로부터 유도된다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 중합체 조성물 중의 APC 사슬은 구조 **P8**을 가지는 사슬을 포함한다:



[0255]

여기서  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $R^3$ ,

$R^4$ , Y,  $\textcircled{Z}$  및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

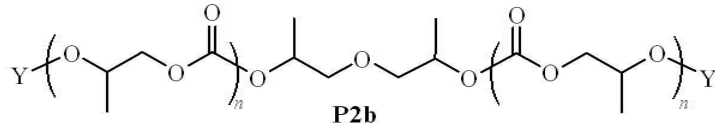
[0256]

특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$  는: 프탈산, 이소프탈산, 테레프탈산, 말레산, 석신산, 말론산, 글루타르산,





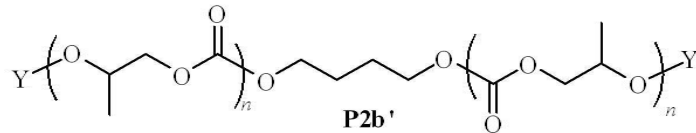
[0268] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0269]

[0270] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

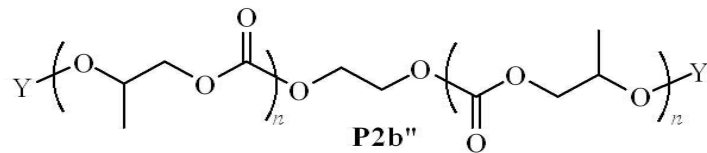
[0271] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0272]

[0273] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

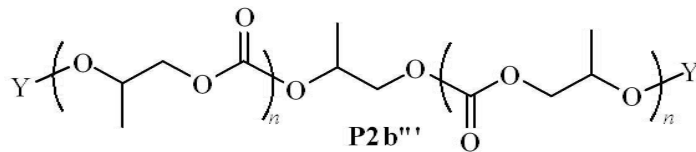
[0274] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0275]

[0276] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

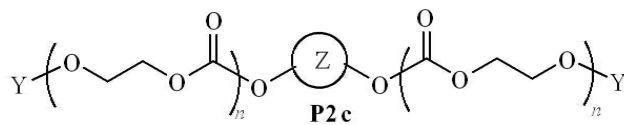
[0277] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0278]

[0279] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

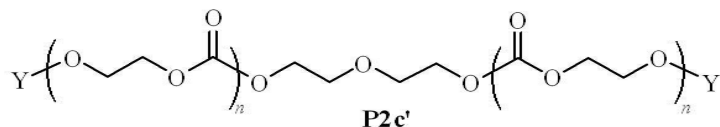
[0280] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0281]

[0282] 여기서  $\textcircled{Z}$ , -Y, 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

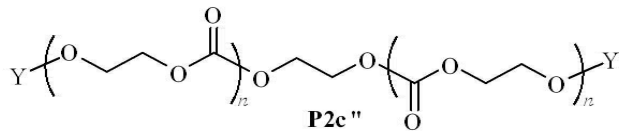
[0283] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0284]

[0285] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

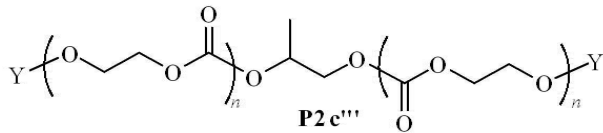
[0286] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0287]

[0288] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

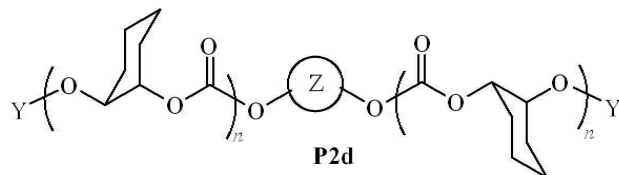
[0289] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0290]

[0291] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

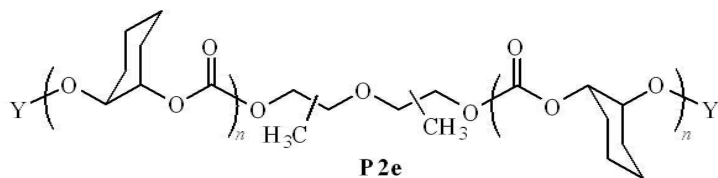
[0292] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0293]

[0294] 여기서  $\textcircled{Z}$ , -Y, 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

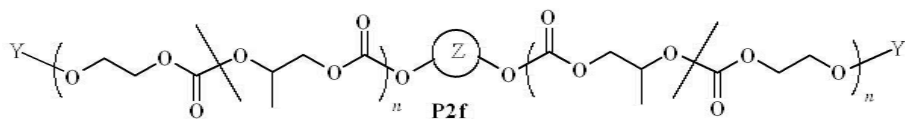
[0295] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0296]

[0297] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

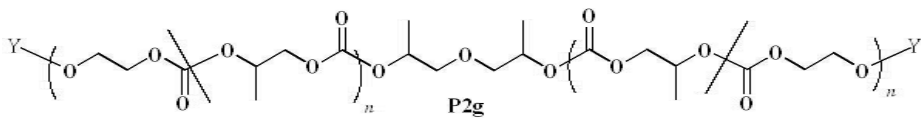
[0298] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0299]

[0300] 여기서  $\textcircled{Z}$ , -Y, 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

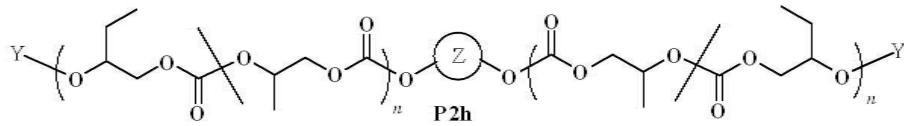
[0301] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0302] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

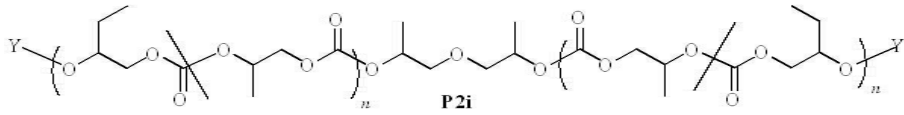
[0303] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0304] 여기서  $\textcircled{Z}$ , -Y, 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

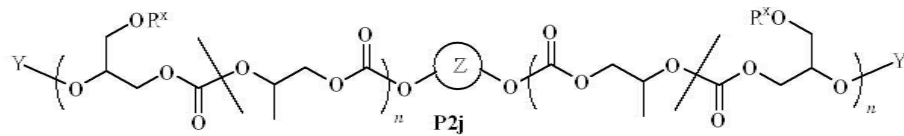
[0305] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0306] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

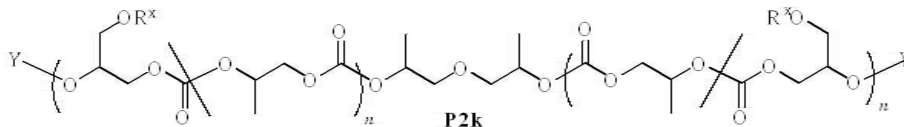
[0307] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0308] 여기서  $\textcircled{Z}$ , -Y,  $R^x$ , 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

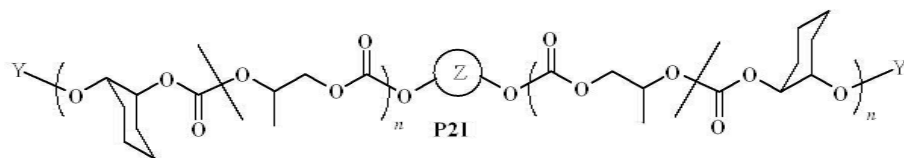
[0309] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0310] 여기서 -Y,  $R^x$ , 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

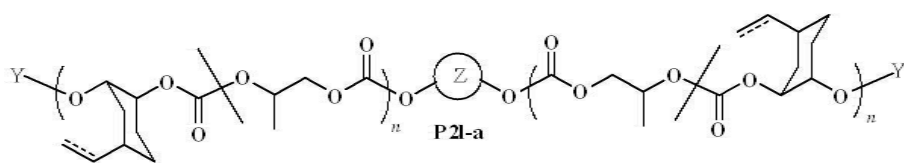
[0311] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0312] 여기서  $\textcircled{Z}$ , -Y, 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

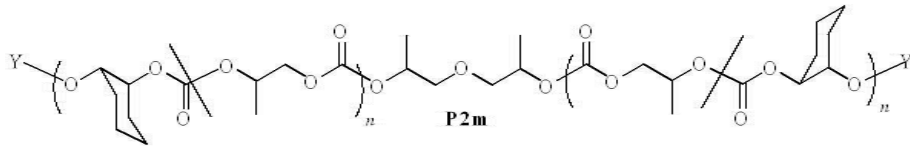
[0313] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0314] 여기서  $\textcircled{Z}$ , -Y, 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같고; 각각의  $\equiv$  은 독립적으로 단일 또는 이중 결합을 나타낸다.

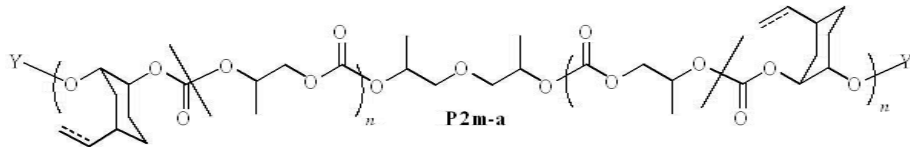
[0315] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0316] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

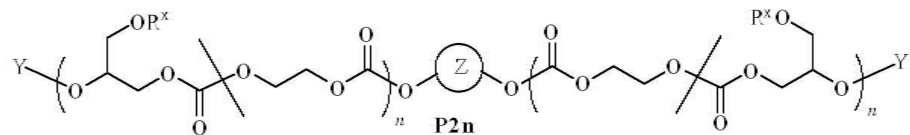
[0317] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0318] 여기서 -Y,  $\equiv$ , 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

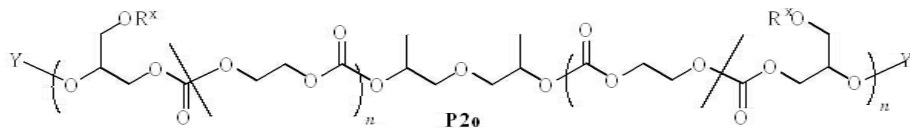
[0319] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0320] 여기서  $\textcircled{Z}$ ,  $R^x$ , -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

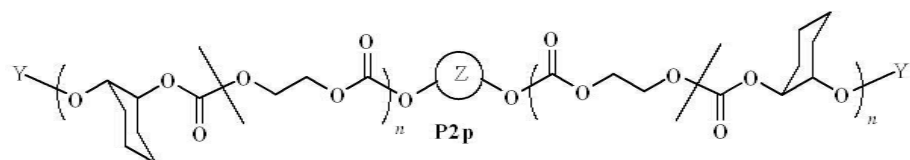
[0321] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0322] 여기서 -Y,  $R^x$ , 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

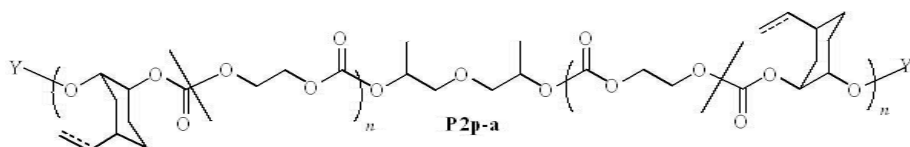
[0323] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0324] 여기서  $\textcircled{Z}$ , -Y, 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

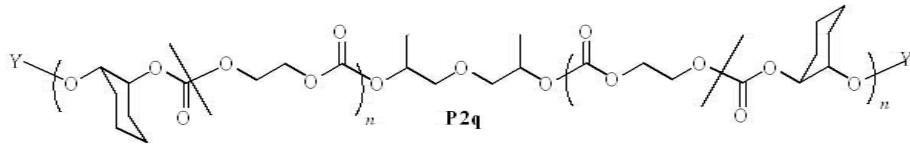
[0325] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0326] 여기서 -Y,  $\equiv$ , 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

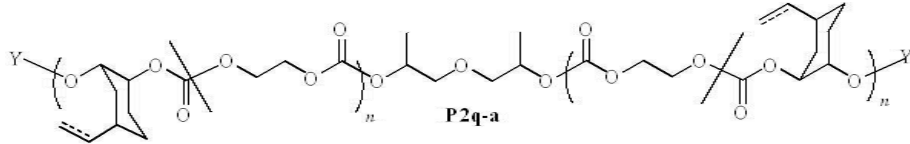
[0327] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0328] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

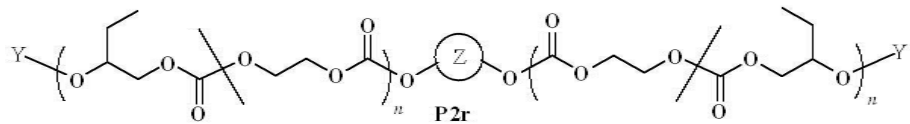
[0329] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0330] 여기서 -Y,  $\text{---}$ , 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

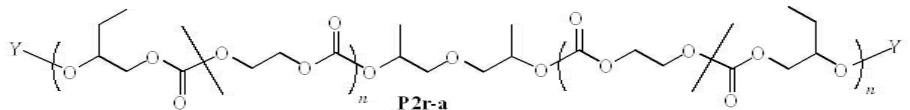
[0331] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은



을 포함하고

[0332] 여기서  $\text{---}$ , -Y, 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

[0333] 특정한 구체예에서, APC 폴리올 사슬은 다음을 포함하고



[0334] 여기서 -Y 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

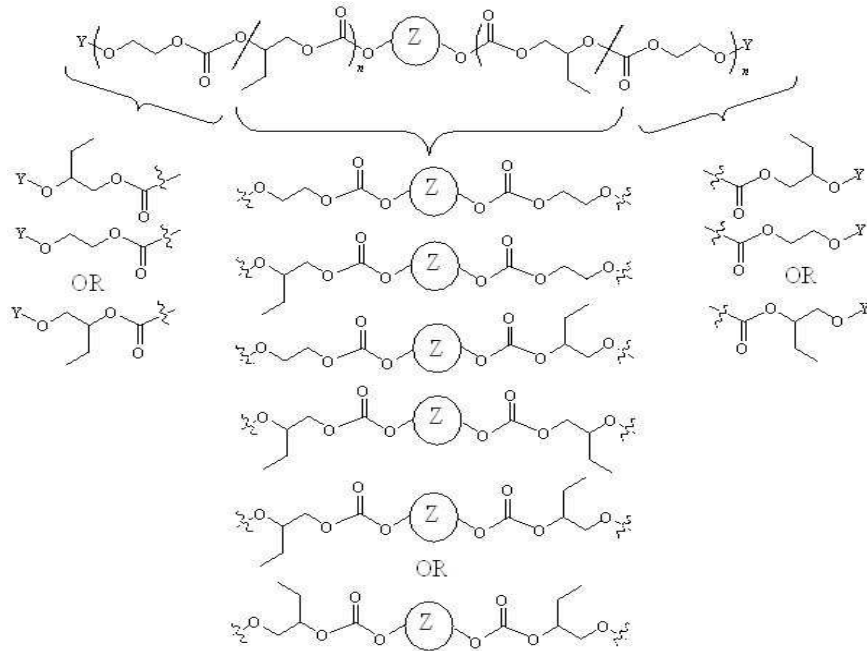
[0335] 특정한 구체예에서, 구조 P2a, P2c, P2d, P2f, P2h, P2j, P2l, P2l-a, P2n, P2p, 및 P2r의 폴리카보네이트에서,  $\text{---}$ 는 에틸렌 글리콜; 디에틸렌 글리콜, 트리에틸렌 글리콜, 1,3 프로판 디올; 1,4 부탄 디올, 헥실렌 글리콜, 1,6 헥산 디올, 프로필렌 글리콜, 디프로필렌 글리콜, 트리프로필렌 글리콜, 및 이들 중 어느 것의 알콕시화 유도체로 이루어진 군으로부터 선택된다.

[0336] 둘 이상의 에폭사이드로부터 유도된 반복 단위를 포함하는 폴리카보네이트, 예컨대 위에 나타난 구조 P2f 내지 P2r에 의하여 제시된 것에 있어서, 도시된 구조가 명백하게 묘사되지 않은 위치 이성질체 또는 레지오이성질체의 혼합을 나타낼 수 있음을 이해해야 한다. 예를 들어, 폴리카보네이트 사슬의 어느 말단 그룹에 인접한 중합체 반복 단위는 공중합체를 포함하는 두 에폭사이드 중 어느 하나로부터, 또는 두 에폭사이드 중 단지 하나로부터 유도될 수 있다. 따라서, 비록 중합체가 말단 그룹에 부착된 특정한 반복 단위를 가지는 것으로 도해될 수 있기는 하지만, 말단 반복 단위가 두 에폭사이드 중 어느 하나로부터 유도될 수 있고, 주어진 중합체 조성물이 가변적인 비율로 모든 가능한 혼합물을 포함할 수 있다. 이들 말단-그룹의 비율은 중합에서 사용된 여러 상이한 에폭사이드의 비율, 사용된 촉매의 구조, 사용된 반응 조건(즉 온도, CO<sub>2</sub> 압력 등)을 포함하는 여러 인자에 의하여 또한 반응 성분의 적시 첨가에 의하여 영향을 받을 수 있다.

[0337] 유사하게, 상기 도면이 치환된 에폭사이드로부터 유도된 반복 단위에 대하여 정의된 위치화학을 나타낼 수 있기는 하지만, 중합체 조성물이, 일부 경우에, 레지오이성질체(regioisomer)의 혼합물을 포함할 것이다. 주어진 중합의 위치선택성은 사용된 촉매의 구조 및 이용된 반응 조건을 포함하는 다수의 인자에 의하여 영향을 받을 수 있다. 명확하게 하기 위하여, 이는 상기 구조 P2r에 의하여 나타난 조성물이, 여러 아래 도표에 나타나는 화합물의 혼합물을 포함할 수 있음을 의미한다. 이 도표는 중합체 P2r에 대하여 이성질체를 도식적으로 나타내며, 여기서 사슬의 묘사 아래의 구조가 사슬전달제 및 주 중합체 사슬의 각각의 측면 상의 말단 그룹에 인접한 단량체 단위에 대하여 가능한 각각의 레지오- 및 위치 이성질체를 나타낸다. 중합체 상의 각각의 말단 그룹이 좌측

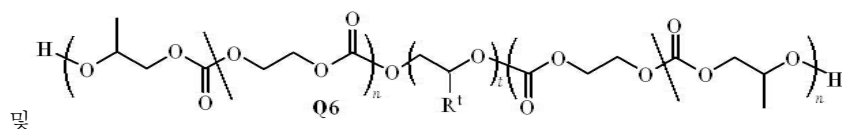
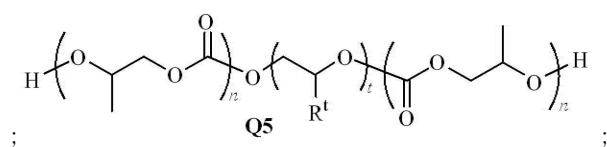
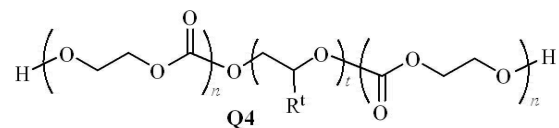
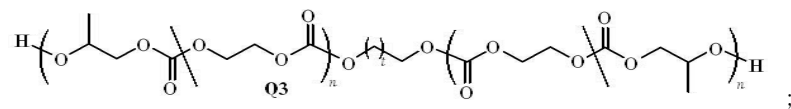
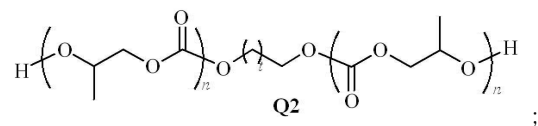
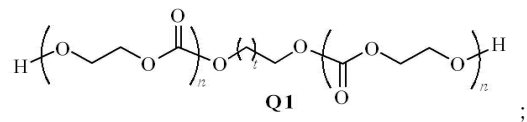


또는 우측에 나타나는 그룹으로부터 독립적으로 선택될 수 있는 한편, 사슬전달제 및 둘의 인접한 단량체 단위를 포함하는 중합체의 중간 부분이 나타난 그룹으로부터 독립적으로 선택될 수 있다. 특정한 구체예에서, 중합체 조성물은 이들의 모든 가능한 조합의 혼합물을 포함한다. 다른 구체예에서, 중합체 조성물은 이들 중 하나 이상에서 농축된다.



[0338]

특정한 구체예에서, APC 폴리올은 Q1, Q2, Q3, Q4, Q5, Q6, 및 이들 중 임의의 둘 이상의 혼합으로 이루어진 군으로부터 선택된다.



및

- [0346] 여기서,  $t$ 는 1 내지 12의 정수이고,  $R^t$ 는 독립적으로 각각의 존재에서 -H, 또는 -CH<sub>3</sub>이다.
- [0347] 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:
- [0348] 약 500 g/mol 내지 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 85% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q1**의 폴리(에틸렌 카보네이트);
- [0349] 약 500 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 85% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q1**의 폴리(에틸렌 카보네이트);
- [0350] 약 1,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 85% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q1**의 폴리(에틸렌 카보네이트);
- [0351] 약 2,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 85% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q1**의 폴리(에틸렌 카보네이트);
- [0352] 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 85% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q1**의 폴리(에틸렌 카보네이트);
- [0353] 약 500 g/mol 내지 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q2**의 폴리(프로필렌 카보네이트);
- [0354] 약 500 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q2**의 폴리(프로필렌 카보네이트);
- [0355] 약 1,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q2**의 폴리(프로필렌 카보네이트);
- [0356] 약 2,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q2**의 폴리(프로필렌 카보네이트);
- [0357] 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q2**의 폴리(프로필렌 카보네이트);
- [0358] 약 500 g/mol 내지 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 90% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q3**의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);
- [0359] 약 500 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 90% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q3**의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);
- [0360] 약 1,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 90% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q3**의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);
- [0361] 약 2,000 g/mol의 평균 분자량 수 (예를 들어  $n$ 은 평균하여 약 10 내지 약 11임), 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 90% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q3**의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);
- [0362] 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q3**의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);
- [0363] 약 500 g/mol 내지 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수 (예를 들어 각각의  $n$ 이 약 4 내지 약 16임), 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q4**의 폴리(에틸렌 카보네이트);
- [0364] 약 500 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 85% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q4**의 폴리(에틸렌 카보네이트);
- [0365] 약 1,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 85% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 **Q4**의 폴리(에틸렌 카보네이트);
- [0366] 약 2,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 85% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH

말단 그룹을 가지는 화학식 Q4의 폴리(에틸렌 카보네이트);

[0367] 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 85% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q4의 폴리(에틸렌 카보네이트);

[0368] 약 500 g/mol 내지 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q5의 폴리(프로필렌 카보네이트);

[0369] 약 500 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q5의 폴리(프로필렌 카보네이트);

[0370] 약 1,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q5의 폴리(프로필렌 카보네이트);

[0371] 약 2,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q5의 폴리(프로필렌 카보네이트);

[0372] 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q5의 폴리(프로필렌 카보네이트);

[0373] 약 500 g/mol 내지 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 90% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q6의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);

[0374] 약 500 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 90% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q6의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);

[0375] 약 1,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 90% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q6의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);

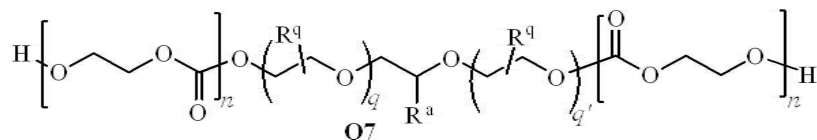
[0376] 약 2,000 g/mol의 평균 분자량 수 (예를 들어  $n$ 은 평균하여 약 10 내지 약 11임), 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 90% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q6의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트); 및

[0377] 약 3,000 g/mol의 평균 분자량 수, 약 1.25 미만의 다분산 지수, 최소 95% 카보네이트 연결, 및 최소 98% -OH 말단 그룹을 가지는 화학식 Q6의 폴리(에틸렌-코-프로필렌 카보네이트);

[0378] 특정한 구체예에서, 합입된 사슬전달제  $\textcircled{Z}$ 는 중합체 디올 또는 고급 다가 알코올로부터 유도된 모이어티이다.

특정한 구체예에서, 그러한 중합체 알코올은 폴리에테르 또는 폴리에스테르 폴리올이다. 특정한 구체예에서  $\textcircled{Z}$ 는 에틸렌 글리콜 또는 프로필렌 글리콜 반복 단위 ( $-\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{O}-$ , 또는  $-\text{OCH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{O}-$ ) 또는 이들의 조합을 포함하는 폴리에테르 폴리올이다. 특정한 구체예에서,  $\textcircled{Z}$ 는 디올 및 디에시드의 반응 생성물, 또는 락톤의 고리-열림 중합으로부터 유도된 물질을 포함하는 폴리에스테르 폴리올이다.

[0379]  $\textcircled{Z}$ 가 폴리에테르 디올을 포함하는 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 구조 Q7을 가지고:



[0380]

[0381] 여기서,

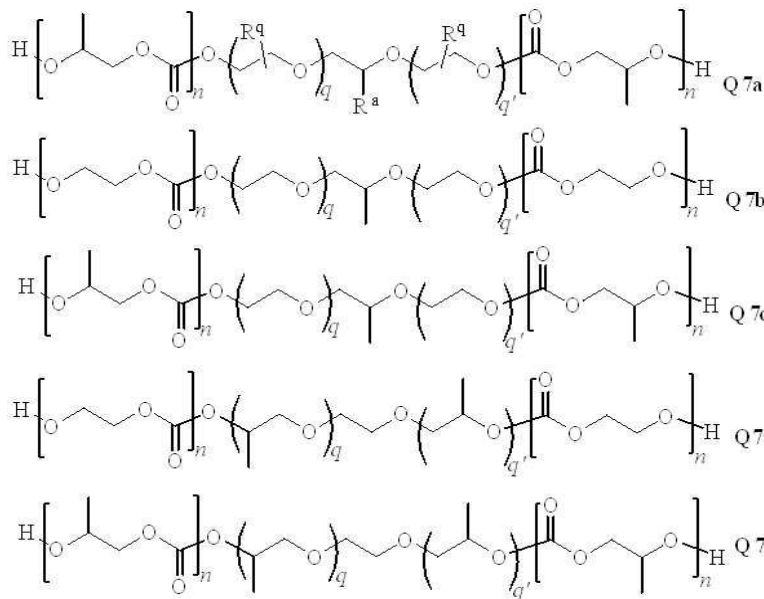
[0382]  $R^q$ 는 중합체 사슬에서 각각의 존재에서 독립적으로 -H 또는  $-\text{CH}_3$ 이고;

[0383]  $R^a$ 는 -H, 또는  $-\text{CH}_3$ 이고;

[0384]  $q$  및  $q'$ 은 독립적으로 약 2 내지 약 40의 정수이고; 그리고

[0385]  $n$ 은 위에서 그리고 본 명세서에서 구체예 및 실시예에서 정의된 바와 같다.

[0386]           특정한 구체예에서, APC 폴리올은 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:

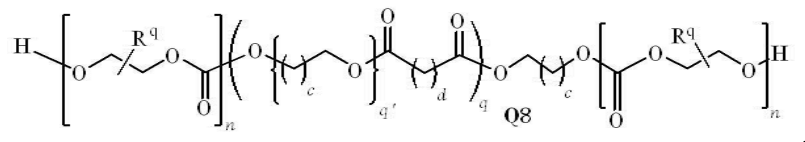


[0387]

[0388] 여기서  $R^a$ ,  $R^q$ ,  $q$ ,  $q'$ , 및  $n$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

[0389] 특정한 구체예에서, APC 폴리올이 구조 Q7와 일치하는 화합물을 포함하는 경우에, 모이머티<sup>(Z)</sup>는 폴리우레탄 폼 조성물의 배합물에서 전형적으로 사용되는 것과 같은 상용화되어 입수 가능한 폴리에테르 폴리올로부터 유도된다.

[0390] <sup>(z)</sup>가 폴리에스테르 디올을 포함하는 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 구조 Q8을 가지고:



[0391]

[0392] 여기서,

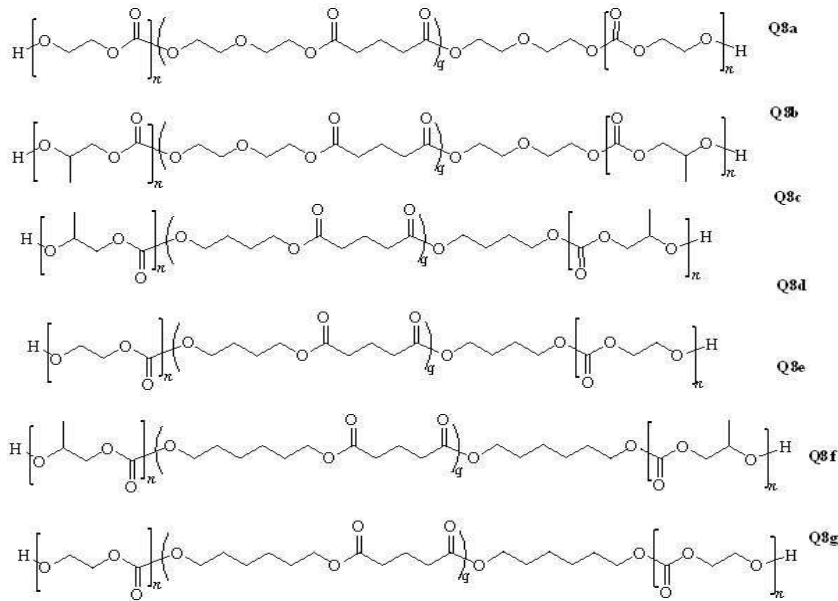
[0393]  $c$ 는 중합체 사슬에서 각각의 존재에서 독립적으로 0 내지 6의 정수이고;

[0394]  $d$ 는 중합체 사슬에서 각각의 존재에서 독립적으로 1 내지 11의 정수이고;

[0395]  $q'$  은 중합체 사슬에서 각각의 존재에서 독립적으로 1 내지 10의 정수이고; 그리고

[0396]  $R^q$ ,  $n$ , 및  $q$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

[0397] 특정한 구체예에서, APC 폴리올은 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다:



[0398]

[0399] 여기서  $n$  및  $q$  각각은 위에 정의된 것 및 본 명세서에서 클래스 및 서브클래스에 기재된 것과 같다.

[0400] 특정한 구체예에서, APC 폴리올이 구조 Q8와 일치하는 화합물을 포함하는 경우에, 모이머티 <sup>(Z)</sup>는 폴리우레탄 폼 조성물의 배합물에서 전형적으로 사용되는 것과 같은 상용화되어 입수 가능한 폴리에스테르 폴리올로부터 유도된다.

[0401] **부록 B - 이소시아네이트 시약**

[0402] 이 섹션은 본 발명의 방법 및 조성물에서 유용성을 가지는 폴리이소시아네이트 중 일부를 설명한다. 일부 구체예에서, 본 발명의 조성물은 이소시아네이트 시약 또는 이의 반응 생성물을 포함한다. 이들 이소시아네이트 시약의 목적은 사슬 연장 및/또는 가교를 통하여 고급 분자량 구조를 형성하기 위하여 APC 폴리올 상의 반응성 말단 그룹과 반응시키는 것이다.

[0403] 폴리우레탄 합성 분야는 잘 발전되어 있고, 매우 많은 수의 이소시아네이트 및 관련 폴리우레탄 전구체가 당해 분야에 공지이며 상용화되어 입수 가능하다. 비록 본 명세서의 이러한 섹션이 본 발명의 특정한 구체예에서 사용하기에 적절한 이소시아네이트를 설명하기는 하지만, 폴리우레탄 배합물 분야의 당업자의 능력 내에서 본 발명의 범위 내의 물질의 추가적인 조성물을 배합하기 위하여 본 개시의 교시에 따라 대안의 이소시아네이트를 사용함을 이해해야 한다. 적절한 이소시아네이트 화합물 및 관련 방법의 기재가: Chemistry and Technology of Polyols for Polyurethanes Ionescu, Mihail 2005 (ISBN 978-1-84735-035-0), 및 H. Ulrich, "Urethane Polymers," Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 1997에서 발견될 수 있고 이들 각각의 전체가 본 명세서에 참조로 포함된다.

[0404] 특정한 구체예에서, 이소시아네이트 시약은 분자당 둘 이상의 이소시아네이트 그룹을 포함한다. 특정한 구체예에서, 이소시아네이트 시약은 디이소시아네이트이다. 다른 구체예에서, 이소시아네이트 시약은 고급 폴리이소시아네이트, 예컨대 트리이소시아네이트, 테트라이소시아네이트, 이소시아네이트 중합체 또는 소중합체 등이다. 특정한 구체예에서, 이소시아네이트 시약은 지방족 폴리이소시아네이트 또는 지방족 폴리이소시아네이트의 유도체 또는 소중합체이다. 다른 구체예에서, 이소시아네이트는 방향족 폴리이소시아네이트 또는 방향족 폴리이소시아네이트의 유도체 또는 소중합체이다. 특정한 구체예에서, 조성물은 상기 유형의 이소시아네이트 중 임의의 둘 이상의 혼합물을 포함할 수 있다.

[0405] 특정한 구체예에서, 본 발명의 신규한 물질의 배합물에서 사용된 이소시아네이트 성분은 2 이상의 관능성을 가진다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 물질의 이소시아네이트 성분은 주어진 적용물을 위한 특정 관능성 수를 달성하도록 배합된 디이소시아네이트 및 고급 이소시아네이트의 혼합물을 포함한다. 특정한 구체예에서, 본 발명의 조성물이 연결 폼 또는 연결 탄성체인 경우에, 사용된 이소시아네이트는 약 2의 관능성을 가진다. 특정한 구



체예에서, 그러한 이소시아네이트는 약 2 내지 약 2.7의 관능성을 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 이소시아네이트는 약 2 내지 약 2.5의 관능성을 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 이소시아네이트는 약 2 내지 약 2.3의 관능성을 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 이소시아네이트는 약 2 내지 약 2.2의 관능성을 가진다.

[0406]

다른 구체예에서, 본 발명의 조성물이 경질 폼 또는 열가소성인 경우에, 사용된 이소시아네이트 2 초과와 관능성을 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 이소시아네이트는 약 2.3 내지 약 4의 관능성을 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 이소시아네이트는 약 2.5 내지 약 3.5의 관능성을 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 이소시아네이트는 약 2.6 내지 약 3.1의 관능성을 가진다. 특정한 구체예에서, 그러한 이소시아네이트는 약 3의 관능성을 가진다.

[0407]

특정한 구체예에서, 이소시아네이트 시약은 다음으로 이루어진 군으로부터 선택된다: 1,6-헥사메틸아민디아소시아네이트(HDI), 이소포론 디아소시아네이트(IPDI), 4,4'-메틸렌-비스(사이클로헥실 이소시아네이트) ( $H_{12}$ MDI), 2,4-톨루엔 디아소시아네이트(TDI), 2,6-톨루엔 디아소시아네이트(TDI), 디페닐메탄-4,4'-디아소시아네이트(MDI), 디페닐메탄-2,4'-디아소시아네이트(MDI), 자일릴렌 디아소시아네이트(XDI), 1,3-비스(이소시아나토메틸)사이클로헥산 ( $H_6$ -XDI), 2,2,4-트리메틸헥사메틸렌 디아소시아네이트, 2,4,4-트리메틸헥사메틸렌 디아소시아네이트(TMDI), m-테트라메틸자일릴렌 디아소시아네이트(TMXDI), p-테트라메틸자일릴렌 디아소시아네이트(TMXDI), 이소시아나토메틸-1,8-옥탄 디아소시아네이트(TIN), 트리페닐메탄-4,4',4'-트리이소시아네이트, 트리스(p-이소시아나토메틸)티오설페이트, 1,3-비스(이소시아나토메틸)벤젠, 1,4-테트라메틸렌 디아소시아네이트, 트리메틸헥산 디아소시아네이트, 1,6-헥사메틸렌 디아소시아네이트, 1,4-사이클로헥실 디아소시아네이트, 리신 디아소시아네이트, 및 이들 중 임의의 둘 이상의 혼합물.

[0408]

본 발명의 특정한 구체예에 적절한 이소시아네이트는 다양한 상품명으로 상용화되어 입수 가능하다. 적절한 상용화되어 입수 가능한 이소시아네이트의 예는 다음 상품명하에 판매되는 물질을 포함한다: Desmodur® (Bayer Material Science), Tolonate® (Perstorp), Takenate® (Takeda), Vestanat® (Evonik), Desmotherm® (Bayer Material Science), Bayhydur® (Bayer Material Science), Mondur (Bayer Material Science), Suprasec (Huntsman Inc.), Lupranate® (BASF), Trixene (Baxenden), Hartben® (Benasedo), Ucopol® (Sapici), 및 Basonat® (BASF). 이들 상품명 각각은 다양한 등급 및 배합물로 입수 가능한 각종 이소시아네이트 물질을 포함한다. 특정 적용분야를 위한 폴리우레탄 조성물을 제조하기 위한 시약으로서 적절한 상용으로 입수 가능한 이소시아네이트 물질의 선택은 앞서 언급한 공급자들에 의하여 제공된 제품 데이터 시트에 제공된 정보와 함께 본 특허 출원의 교시 및 개시를 이용하여 폴리우레탄 기술 분야에서 당업자의 능력 이내이다.

[0409]

일부 구체예에서, 본 발명의 특정한 구체예에 적절한 추가적인 이소시아네이트는 상품명 Lupranate® (BASF)으로 판매된다. 특정한 구체예에서, 이소시아네이트는 표 1에 나타나는 물질로 이루어진 군으로부터 선택된다:

표 1

생성물	설명	% NCO	공칭 관능성
<u>Lupranate M</u>	4,4' MDI	33.5	2
<u>Lupranate MS</u>	4,4' MDI	33.5	2
<u>Lupranate MI</u>	2,4' 및 4,4' MDI 블렌드	33.5	2
<u>Lupranate LP30</u>	액체 순수 4,4' MDI	33.1	2
<u>Lupranate 227</u>	단량체/변성된 MDI 블렌드	32.1	2
<b>카보디이미드 변성된 MDI</b>			
<u>Lupranate 5143</u>	카보디이미드 변성된 4,4' MDI	29.2	2.2
<u>Lupranate MM103</u>	카보디이미드 변성된 4,4' MDI	29.5	2.2
<u>Lupranate 219</u>	카보디이미드 변성된 4,4' MDI	29.2	2.2
<u>Lupranate 81</u>	카보디이미드 변성된 MDI	29.5	2.2
<u>Lupranate 218</u>	카보디이미드 변성된 MDI	29.5	2.2
<b>고분자 MDI (PMDI)</b>			
<u>Lupranate M10</u>	저 관능성 고분자	31.7	2.2
<u>Lupranate R2500U</u>	고분자 MDI 변형물	31.5	2.7
<u>Lupranate M20S</u>	중-관능성 고분자	31.5	2.7
<u>Lupranate M20FB</u>	중-관능성 고분자	31.5	2.7
<u>Lupranate M70L</u>	고-관능성 고분자	31	3
<u>Lupranate M200</u>	고-관능성 고분자	30	3.1
<b>고분자 MDI 블렌드 및 유도체</b>			
<u>Lupranate 241</u>	저 관능성 고분자	32.6	2.3
<u>Lupranate 230</u>	저 점도 고분자	32.5	2.3
<u>Lupranate 245</u>	저 점도 고분자	32.3	2.3
<u>Lupranate TF2115</u>	중 관능성 고분자	32.3	2.4
<u>Lupranate 78</u>	중 관능성 고분자	32	2.3
<u>Lupranate 234</u>	저 관능성 고분자	32	2.4
<u>Lupranate 273</u>	저 점도 고분자	32	2.5
<u>Lupranate 266</u>	저 점도 고분자	32	2.5
<u>Lupranate 261</u>	저 점도 고분자	32	2.5
<u>Lupranate 255</u>	저 점도 고분자	31.9	2.5
<u>Lupranate 268</u>	저 점도 고분자	30.6	2.4
<b>선택 MDI 예비고분자</b>			
<u>Lupranate 5010</u>	고 관능성 예비고분자	28.6	2.3
<u>Lupranate 223</u>	순수한 MDI의 저 점도 유도체	27.5	2.2
<u>Lupranate 5040</u>	중 관능성, 저 점도	26.3	2.1
<u>Lupranate 5110</u>	고분자 MDI 예비고분자	25.4	2.3
<u>Lupranate MP102</u>	4,4' MDI 예비고분자	23	2
<u>Lupranate 5090</u>	특수 4,4' MDI 예비고분자	23	2.1
<u>Lupranate 5050</u>	중 관능성, 중 NCO 예비고분자	21.5	2.1
<u>Lupranate 5030</u>	특수 MDI 예비고분자	18.9	NA
<u>Lupranate 5080</u>	2,4'-MDI 강화 예비고분자	15.9	2
<u>Lupranate 5060</u>	저 관능성, 고 MW 예비고분자	15.5	2
<u>Lupranate 279</u>	저 관능성, 특수 예비고분자	14	2
<u>Lupranate 5070</u>	특수 MDI 예비고분자	13	2
<u>Lupranate 5020</u>	저 관능성, 저 NCO	9.5	2
<b>톨루엔 디이소시아네이트 (TDI)</b>			
<u>Lupranate T80-</u>	80/20 :2,4/2,6 TDI	48.3	2
<u>Lupranate T80-</u>	고 산성도 TDI	48.3	2
<u>Lupranate 8020</u>	80/20:TDI/고분자 MDI	44.6	2.1

[0410]

[0411]

본 발명의 특정한 구체예에 적절한 다른 이소시아네이트는 Bayer Material Science로부터 입수 가능한 상품명 Desmodur®로 판매된다. 특정한 구체예에서, 이소시아네이트는 표 2에 나타나는 물질로 이루어진 군으로부터 선택된다:

표 2

상품명	정의
Desmodur® 2460 M	높은 2,4'-이성질체 함량을 가지는 단량체 디페닐메탄 디이소시아네이트
Desmodur® 44 M	단량체 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI).

[0412]

Desmodur® 44 MC	Desmodur 44 MC Flakes는 단량체 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)이다.
Desmodur® BL 1100/1	TDI에 기초한 블로킹된 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® BL 1265 MPA/X	TDI에 기초한 블로킹된 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® BL 3175 SN	HDI에 기초한 블로킹된, 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® BL 3272 MPA	HDI에 기초한 블로킹된 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® BL 3370 MPA	HDI에 기초한 블로킹된 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® BL 3475 BA/SN	HDI / IPDI에 기초한 지방족 가교 가열건조(stoving) 우레탄 수지
Desmodur® BL 3575/1 MPA/SN	HDI에 기초한 블로킹된 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® BL 4265 SN	IPDI에 기초한 블로킹된, 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® BL 5375	H 12 MDI에 기초한 블로킹된 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® CD-L	Desmodur CD-L은 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트에 기초한 변성된 이소시아네이트이다.
Desmodur® CD-S	Desmodur CD-S는 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트에 기초한 변성된 이소시아네이트이다.
Desmodur® D XP 2725	친수성으로 변성된 폴리이소시아네이트
Desmodur® DA-L	헥사메틸렌 디이소시아네이트에 기초한 친수성 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® DN	낮은 휘발도의 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® E 1160	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E 1361 BA	톨루일렌 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E 1361 MPA/X	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E 14	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E 15	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® E 1660	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® E 1750 PR	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E 20100	디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 변성된 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® E 21	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® E 2190 X	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E 22	디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® E 2200/76	Desmodur E 2200/76은 이성질체를 가지는 (MDI)에 기초한 예비중합체이다.
Desmodur® E 23	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® E 29	디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® E 305	Desmodur E 305는 헥사메틸렌 디이소시아네이트에 기초한 주로 선형인 지방족 NCO 예비중합체이다.
Desmodur® E 3265 MPA/SN	헥사메틸렌 디이소시아네이트(HDI)에 기초한 지방족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E 3370	헥사메틸렌 디이소시아네이트에 기초한 지방족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E XP 2605	톨루엔 디이소시아네이트 및 디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E XP 2605	톨루엔 디이소시아네이트 및 디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E XP 2715	2,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(2,4'-MDI) 및 헥산디올 아디페이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E XP 2723	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.

Desmodur® E XP 2726	2,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(2,4'-MDI)에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® E XP 2727	디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® E XP 2762	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® H	단량체 지방족 디이소시아네이트
Desmodur® HL	톨루일렌 디이소시아네이트/ 헥사메틸렌 디이소시아네이트에 기초한 방향족/지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® I	단량체 사이클로지방족 디이소시아네이트.
Desmodur® IL 1351	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® IL 1451	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® IL BA	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® IL EA	톨루일렌 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 수지
Desmodur® L 1470	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® L 67 BA	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® L 67 MPA/X	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® L 75	톨루엔 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® LD	헥사메틸렌 디이소시아네이트(HDI)에 기초한 저-관능성 이소시아네이트
Desmodur® LS 2424	높은 2,4'-이성질체 함량을 가지는 단량체 디페닐메탄 디이소시아네이트
Desmodur® MT	디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® N 100	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 뷰렛)
Desmodur® N 3200	지방족 폴리이소시아네이트 (저점도 HDI 뷰렛)
Desmodur® N 3300	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼합체)
Desmodur® N 3368 BA/SN	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼합체)
Desmodur® N 3368 SN	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼합체)
Desmodur® N 3386 BA/SN	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼합체)
Desmodur® N 3390 BA	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼합체)
Desmodur® N 3390 BA/SN	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 삼합체)
Desmodur® N 3400	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 우레트디온)
Desmodur® N 3600	지방족 폴리이소시아네이트 (저점도 HDI 삼합체)
Desmodur® N 3790 BA	지방족 폴리이소시아네이트 (고 관능성 HDI 삼합체)
Desmodur® N 3800	지방족 폴리이소시아네이트 (연질화 HDI 삼합체)
Desmodur® N 3900	헥사메틸렌 디이소시아네이트에 기초한 저점도, 지방족 폴리이소시아네이트 수지
Desmodur® N 50 BA/MPA	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 뷰렛)
Desmodur® N 75 BA	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 뷰렛)
Desmodur® N 75 MPA	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 뷰렛)
Desmodur® N 75 MPA/X	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 뷰렛)
Desmodur® NZ 1	지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® PC-N	Desmodur PC-N은 변성된 디페닐-메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)이다.
Desmodur® PF	Desmodur PF는 변성된 디페닐-메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)이다.
Desmodur® PL 340, 60 % BA/SN	IPDI에 기초한 블로킹된 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® PL 350	HDI에 기초한 블로킹된 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® RC	에틸 아세테이트 중의 톨루엔 디이소시아네이트(TDI)의 폴리이소시아나이드.
Desmodur® RE	에틸 아세테이트 중의 트리페닐메탄-4,4',4''-트리이소시아네이트의 용액
Desmodur® RFE	에틸 아세테이트 중의 트리스(p-이소시아나토펜) 티오포스페이트의 용액
Desmodur® RN	에틸 아세테이트 중의 지방족 및 방향족 NCO 그룹을 가지는 폴리이소시아나이드의 용액.
Desmodur® T 100	순수한 2,4'-톨루엔 디이소시아네이트(TDI)
Desmodur® T 65 N	비율 67 : 33의 2,4- 및 2,6-톨루엔 디이소시아네이트(TDI)

Desmodur® T 80	비율 80 : 20의 2,4- 및 2,6-톨루엔 디이소시아네이트(TDI)
Desmodur® T 80 P	증가된 함량의 가수분해성 염소를 가지는, 비율 80 : 20의 2,4- 및 2,6-톨루엔 디이소시아네이트(TDI)
Desmodur® VH 20 N	디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 폴리이소시아네이트
Desmodur® VK	Desmodur VK 제품은 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)와 이성질체 및 고급 관능성 동족체 (PMDI)의 재혼합물이다.
Desmodur® VKP 79	Desmodur VKP 79는 변성된 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)와 이성질체 및 동족체이다.
Desmodur® VKS 10	Desmodur VKS 10은 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)와 이성질체 및 고급 관능성 동족체(PMDI)의 혼합물이다.
Desmodur® VKS 20	Desmodur VKS 20은 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)와 이성질체 및 고급 관능성 동족체(PMDI)의 혼합물이다.
Desmodur® VKS 20 F	Desmodur VKS 20 F는 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)와 이성질체 및 고급 관능성 동족체(PMDI)의 혼합물이다.
Desmodur® VKS 70	Desmodur VKS 70은 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)와 이성질체 및 동족체의 혼합물이다.
Desmodur® VL	디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® VP LS 2078/2	IPDI에 기초한 블로킹된 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® VP LS 2086	디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® VP LS 2257	HDI에 기초한 블로킹된 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® VP LS 2371	이소포론 디이소시아네이트에 기초한 지방족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® VP LS 2397	Desmodur VP LS 2397은 폴리프로필렌 에테르 클리콜 및 디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)에 기초한 선형 예비중합체이다. 이는 이소시아네이트 그룹을 포함한다.
Desmodur® W	단량체 사이클로지방족 디이소시아네이트
Desmodur® W/1	단량체 사이클로지방족 디이소시아네이트
Desmodur® XP 2404	Desmodur XP 2404는 단량체 폴리이소시아네이트의 혼합물이다
Desmodur® XP 2406	이소포론 디이소시아네이트에 기초한 지방족 폴리이소시아네이트 예비중합체
Desmodur® XP 2489	지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® XP 2505	Desmodur XP 2505는 디페닐메탄-4,4'-디이소시아네이트(MDI)와 이성질체 및 고급 관능성 동족체(PMDI)에 기초한 에테르 그룹을 포함하는 예비중합체이다.
Desmodur® XP 2551	디페닐메탄 디이소시아네이트에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트
Desmodur® XP 2565	이소포론 디이소시아네이트에 기초한 저점도, 지방족 폴리이소시아네이트 수지.
Desmodur® XP 2580	헥사메틸렌 디이소시아네이트에 기초한 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® XP 2599	에테르 그룹을 포함하고 헥사메틸렌-1,6-디이소시아네이트(HDI)에 기초한 지방족 예비중합체
Desmodur® XP 2617	Desmodur XP 2617은 헥사메틸렌 디이소시아네이트에 기초한 주로 선형인 NCO 예비중합체이다.
Desmodur® XP 2665	디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)에 기초한 방향족 폴리이소시아네이트 예비중합체.
Desmodur® XP 2675	지방족 폴리이소시아네이트 (고도로 관능성인 HDI 삼합체)
Desmodur® XP 2679	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 알로파네이트 삼합체)
Desmodur® XP 2714	헥사메틸렌 디이소시아네이트에 기초한 실란-관능성 지방족 폴리이소시아네이트
Desmodur® XP 2730	저점도, 지방족 폴리이소시아네이트(HDI 우레트디온)
Desmodur® XP 2731	지방족 폴리이소시아네이트 (HDI 알로파네이트 삼합체)
Desmodur® XP 2742	변성된 지방족 폴리이소시아네이트 (HDI-삼합체), SiO <sub>2</sub> -나노입자를 포함

[0413]

일부 구체예에서, 본 발명의 특정한 구체예에 적절한 이소시아네이트는 상품명 Tolonate®(Perstorp)로 판매된다. 특정한 구체예에서, 이소시아네이트는 표 3에 나타나는 물질로 이루어진 군으로부터 선택된다:

표 3

[0414]

Tolonate™ D2	방향족 용매 중의 75 % 고체로 공급된, 블로킹된 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ HDB	접성 무용매 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ HDB-LV	무용매 저점도 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ HDB 75 B	메톡시 프로필 아세테이트 중의 75% 고체로 제공된, 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ HDB 75 BX	75% 고체로 공급된 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ HDT	중간 점도, 무용매 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ HDT-LV	무용매 저점도 지방족 폴리이소시아네이트임
Tolonate™ HDT-LV2	무용매, 매우 저점도인 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ HDT 90	90% 고체로 공급된, HDI-삼합체 (이소시아누레이트)에 기초한 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ HDT 90 B	90% 고체로 공급된, HDI-삼합체 (이소시아누레이트)에 기초한 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ IDT 70 B	70% 고체로 공급된, HDI-삼합체 (이소시아누레이트)에 기초한 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ IDT 70 S	70% 고체로 공급된, HDI-삼합체 (이소시아누레이트)에 기초한 지방족 폴리이소시아네이트
Tolonate™ X FD 90 B	90% 고체로 공급된, HDI-삼합체에 기초한 고 관능성, 속건성 지방족 폴리이소시아네이트

[0415]

일부 구체예에서, 본 발명의 특정한 구체예에 적절한 이소시아네이트는 Bayer Material Science로부터 입수 가능한 상품명 Mondur ®로 판매된다. 특정한 구체예에서, 이소시아네이트는 표 4에 나타나는 물질로 이루어진 군으로부터 선택된다:

표 4

[0416]

상품명	정의
MONDUR 445	TDI/MDI 블렌드 폴리이소시아네이트; 톨루엔 디이소시아네이트 및 중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트의 블렌드; NCO 중량 44.5-45.2%
MONDUR 448	변성된 중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI) 예비중합체; NCO 중량 27.7%; 점도 140 mPa · s @ 25℃; 등중량 152; 관능성 2.2
MONDUR 489	변성된 중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 31.5%; 점도 700 mPa · s @ 25℃; 등중량 133; 관능성 3.0
MONDUR 501	변성된 단량체 디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); 이소시아네이트-종결된 폴리에스테르 예비중합체; NCO 중량 19.0%; 점도 1,100 mPa · s @ 25℃; 등중량 221; 관능성 2
MONDUR 541	중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); 복합 목재 제품용 및 접착제 배합물 중의 원료로서의 결합제; NCO 중량 31.5%; 점도 200 mPa · s @ 25℃
MONDUR 582	중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); 복합 목재 제품용 및 접착제 배합물 중의 원료로서의 결합제; NCO 중량 31.0%; 점도 200 mPa · s @ 25℃
MONDUR 541-Light	중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 32.0%; 점도 70 mPa · s @ 25℃; 등중량 131; 관능성 2.5
MONDUR 841	변성된 중합체 MDI 예비중합체; NCO, Wt 30.5%; 산성도, Wt 0.02%; 아민 당량 132; 점도 25℃에서, mPa · s 350; 비중 25℃에서 1.24; 인화점, PMCC, ° F >200
MONDUR 1437	변성된 디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); 이소시아네이트-종결된 폴리에테르 예비중합체; NCO 중량 10.0%; 점도 2,500 mPa · s @ 25℃; 등중량 420; 관능성 2
MONDUR 1453	변성된 디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); 폴리프로필렌 에테르 글리콜(PPG)에 기초한 이소시아네이트-종결된 폴리에테르 예비중합체; NCO 중량 16.5%; 점도 600 mPa · s @ 25℃; 등중량 254; 관능성 2
MONDUR 1515	변성된 중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI) 예비중합체; 특히 가전제품 산업을 위한 경질 폴리우레탄 폼의 제조에서 사용됨; NCO 중량 30.5%; 점도 350 mPa · s @ 25℃
MONDUR 1522	변성된 단량체 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); NCO 중량 29.5%; 점도 50 mPa · s @ 25℃; 등중량 143; 관능성 2.2
MONDUR MA-2300	변성된 단량체 MDI, 알로파네이트-변성된 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); NCO 중량 23.0%; 점도 450 mPa · s @ 25℃; 등중량 183; 관능성 2.0
MONDUR MA 2600	변성된 단량체 MDI, 알로파네이트-변성된 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); NCO 중량 26.0%; 점도 100 mPa · s @ 25℃; 등중량 162; 관능성 2.0



MONDUR MA 2601	방향족 디이소시아네이트 블렌드, 2,4'-이성질체를 포함하는 중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI)와 블렌딩된 알로파네이트-변성된 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI); NCO 중량 29.0%; 점도 60 mPa·s @ 25℃; 등중량 145; 관능성 2.2
MONDUR MA 2603	MDI 예비중합체; 알로파네이트-변성된 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(MDI)와 블렌딩된 이소시아네이트-중결된 (MDI) 예비중합체 블렌드; NCO 중량 16.0%; 점도 1,050 mPa·s @ 25℃; 등중량 263; 관능성 2.0
MONDUR MA-2902	변성된 단량체 MDI, 알로파네이트-변성된 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); NCO 중량 29.0%; 점도 40 mPa·s @ 25℃; 등중량 145; 관능성 2.0
MONDUR MA-2903	변성된 단량체 MDI; 이소시아네이트-중결된 (MDI) 예비중합체; NCO 중량 19.0%; 점도 400 mPa·s @ 25℃; 등중량 221; 관능성 2.0
MONDUR MA-2904	알로파네이트-변성된 MDI 폴리에테르 예비중합체; NCO 중량 12.0%; 점도 1,800 mPa·s @ 25℃; 등중량 350; 2.0의 관능성
MONDUR MB	고순도 등급 이관능성 이소시아네이트, 디페닐메탄 4,4'-디이소시아네이트; 폴리우레탄 탄성체, 접착제, 코팅의 제조에서 그리고 중간체 폴리우레탄 제품에서 사용됨; 외관 무색 고체 또는 액체; 비중 @ 50℃ ±15.5 1.19; 인화점 202℃ PMCC; 점도 (용해 형태에서) 4.1 mPa·S; 벌크 밀도 10 lb/gal (용해됨) 또는 9.93 lb/gal (용해됨); 동결 온도 39℃
MONDUR MLQ	단량체 디페닐메탄 디이소시아네이트; 폼, 구조 탄성체, 코팅 및 접착제에서 사용됨; 외관 밝은 황색 투명한 액체, NCO 33.4% wt; 1.19 비중 25℃에서, 196℃ 인화점, DIN 51758; 11-15℃ 동결 온도
MONDUR MQ	고순도-등급 이관능성 이소시아네이트, 디페닐메탄 4,4'-디이소시아네이트(MDI); 고체 폴리우레탄 탄성체, 접착제, 코팅의 제조에서 그리고 중간체 폴리우레탄 제품에서 사용됨; 외관 무색 고체 또는 액체; 비중 1.19 @ 50℃; 인화점 202℃ PMCC; 점도 4.1 mPa·S; 벌크 밀도 10 lb./gal (용해됨) 또는 9.93 lb./gal (용해됨); 동결 온도 39℃
MONDUR MR	중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 31.5%; 점도 200 mPa·s @ 25℃; 등중량 133; 관능성 2.8
MONDUR MR LIGHT	중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 31.5%; 점도 200 mPa·s @ 25℃; 등중량 133; 관능성 2.8
MONDUR MR-5	중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 32.5%; 점도 50 mPa·s @ 25℃; 등중량 129; 관능성 2.4
MONDUR MRS	2,4' 농후 중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 31.5%; 점도 200 mPa·s @ 25℃; 등중량 133; 관능성 2.6
MONDUR MRS 2	2,4' 농후 중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 33.0%; 점도 25 mPa·s @ 25℃; 등중량 127; 관능성 2.2
MONDUR MRS-4	2,4' 농후 중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 32.5%; 점도 40 mPa·s @ 25℃; 등중량 129; 관능성 2.4
MONDUR MRS-5	2,4' 농후 중합체 디페닐메탄 디이소시아네이트(pMDI); NCO 중량 32.3%; 점도 55 mPa·s @ 25℃; 등중량 130; 관능성 2.4
MONDUR PC	변성된 4,4' 디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI); NCO 중량 25.8%; 점도 145 mPa·s @ 25℃; 등중량 163; 관능성 2.1
MONDUR PF	변성된 4,4' 디페닐메탄 디이소시아네이트(mMDI) 예비중합체; NCO 중량 22.9%; 점도 650 mPa·s @ 25℃; 등중량 183; 관능성 2
MONDUR TD-65	단량체 톨루엔 디이소시아네이트(TDI); 2,4 및 2,6 TDI의 65/35 혼합물; NCO 중량 48%; 점도 3 mPa·s @ 25℃; 등중량 87.5; 관능성 2
MONDUR TD-80 GRADE A	단량체 톨루엔 디이소시아네이트(TDI); 2,4 및 2,6 이성질체의 80/20 혼합물; NCO 중량 48%; 점도 5 mPa·s @ 25℃; 등중량 87.5; 관능성 2
MONDUR TD-80 GRADE A/GRADE B	단량체 톨루엔 디이소시아네이트(TDI); 2,4 및 2,6 이성질체의 80/20 혼합물; NCO 중량 48%; 점도 5 mPa·s @ 25℃; 등중량 87.5; 관능성 2

[0417]

특정한 구체예에서, 위에 기재된 이소시아네이트 조성물 중 하나 이상이 폴리우레탄 폼 제조 분야에 공지인 A-사이드 혼합물에 전형적인 배합물에 제공된다. 그러한 A 사이드 혼합물은 몰과량의 하나 이상의 폴리이소시아네이트와 반응성 관능기, 예컨대 알코올, 아민, 티올, 카복실레이트 등을 포함하는 반응성 분자의 반응에 의하여 형성된 예비중합체를 포함할 수 있다. A-사이드 혼합물은 용매, 계면활성제, 안정화제, 및 당해 분야에 공지인 다른 첨가제를 또한 포함할 수 있다.

[0418]

#### 다른 구체예

[0419]

앞서 말한 것은 발명의 특정한 비제한적 구체예의 설명이다. 따라서, 본 명세서에 기재된 발명의 구체예는 단지 발명의 원리의 적용의 예시임을 이해해야 한다. 예시된 구체예의 상세한 설명에 대한 본 명세서에서의 언급은 청구의 범위를 제한하도록 의도되지 않고, 청구의 범위는 그 자체가 그러한 특징들을 발명에 필수적인 것으로

간주하도록 나열한다.