

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 公表特許公報(A)

(11) 特許出願公表番号

特表2013-542290

(P2013-542290A)

(43) 公表日 平成25年11月21日(2013.11.21)

(51) Int.Cl.	F I	テーマコード (参考)
CO8L 69/00 (2006.01)	CO8L 69/00	3E086
CO8L 23/02 (2006.01)	CO8L 23/02	4F071
CO8L 23/06 (2006.01)	CO8L 23/06	4J002
CO8L 23/12 (2006.01)	CO8L 23/12	
CO8J 5/18 (2006.01)	CO8J 5/18 CES	

審査請求 未請求 予備審査請求 未請求 (全 96 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2013-533950 (P2013-533950)
 (86) (22) 出願日 平成23年10月11日 (2011.10.11)
 (85) 翻訳文提出日 平成25年6月5日 (2013.6.5)
 (86) 国際出願番号 PCT/US2011/055846
 (87) 国際公開番号 W02012/051219
 (87) 国際公開日 平成24年4月19日 (2012.4.19)
 (31) 優先権主張番号 61/392,010
 (32) 優先日 平成22年10月11日 (2010.10.11)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)
 (31) 優先権主張番号 61/535,573
 (32) 優先日 平成23年9月16日 (2011.9.16)
 (33) 優先権主張国 米国 (US)

(71) 出願人 511046391
 ノボマー, インコーポレイテッド
 アメリカ合衆国 ニューヨーク 1485
 O, イサカ, ダンビー ロード 95
 O, スイート 198
 (74) 代理人 100078282
 弁理士 山本 秀策
 (74) 代理人 100113413
 弁理士 森下 夏樹
 (74) 代理人 100181674
 弁理士 飯田 貴敏
 (74) 代理人 100181641
 弁理士 石川 大輔
 (74) 代理人 230113332
 弁護士 山本 健策

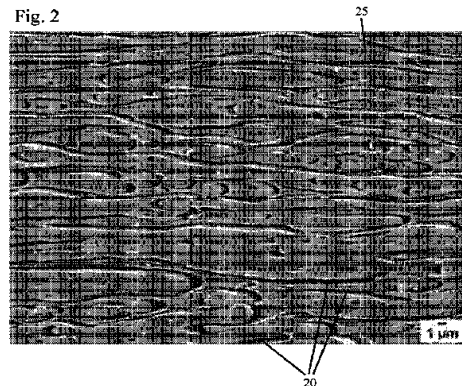
最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 ポリマーブレンド

(57) 【要約】

本発明は、とりわけ、脂肪族ポリカーボネートおよびポリオレフィンの押出ブレンドを提供する。一態様において、提供されるブレンドは、ポリ(プロピレンカーボネート)といった脂肪族ポリカーボネートと、より少ない量の結晶性または半結晶性ポリマーとを含む。ある実施形態において、提供されるブレンドは、それらが、それらの伸長特性における予想外の改善を呈することを特徴とする。別の態様において、本発明は、かかる材料を製作する方法、および消費者包装材料の製造といった用途における材料の適用を提供する。

【選択図】 図2



【特許請求の範囲】**【請求項 1】**

少なくとも 1 つの脂肪族ポリカーボネートと、少なくとも 1 つのポリオレフィンとを含む、押出ポリマーブレンド。

【請求項 2】

前記脂肪族ポリカーボネートは、二酸化炭素および 1 つ以上のエポキシドのコポリマーを含む、請求項 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 3】

前記脂肪族ポリカーボネートは、ポリ（プロピレンカーボネート）；ポリ（エチレンカーボネート）；ポリ（プロピレンカーボネート）- コ - ポリ（エチレンカーボネート）；1 つ以上の追加の脂肪族ポリカーボネートとのポリ（プロピレンカーボネート）コ - ポリマー、1 つ以上の追加の脂肪族ポリカーボネートとのポリ（エチレンカーボネート）コ - ポリマー、上記のうちのいずれか 2 つ以上の物理的ブレンド、および上記のうちのいずれかを含むコポリマーから成る群より選択される、請求項 2 に記載の押出ポリマーブレンド。

10

【請求項 4】

ポリ（プロピレンカーボネート）を含む、請求項 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

20

【請求項 5】

ポリ（エチレンカーボネート）を含む、請求項 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 6】

前記ポリオレフィン、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリスチレン、ポリ（アルファオレフィン）、ポリ塩化ビニル、およびこれらのうちのいずれか 2 つ以上の混合物またはコポリマーから成る群より選択される、請求項 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 7】

前記ポリオレフィン、LDPE、LLDPE、HDPE、ポリプロピレン、または上記のいずれかの組み合わせから成る群より選択される、請求項 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

30

【請求項 8】

前記ポリオレフィン、ポリエチレンを含む、請求項 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 9】

前記ポリオレフィン、ポリプロピレンを含む、請求項 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

40

【請求項 10】

少なくとも 1 つの相溶化剤をさらに含む、請求項 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 11】

前記脂肪族ポリカーボネートは、前記ブレンドの重量の 50% 未満に相当する、請求項 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 12】

前記脂肪族ポリカーボネートは、前記ブレンドの約 5% ~ 約 50% に相当する、請求項

50

1 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 1 3】

前記脂肪族ポリカーボネートは、前記ブレンドの約 5 % ~ 約 3 0 % に相当する、請求項 1 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 1 4】

前記脂肪族ポリカーボネートは、前記ブレンドの約 1 0 % ~ 約 2 5 % に相当する、請求項 1 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

10

【請求項 1 5】

前記ポリオレフィン、前記ブレンドの重量の 5 0 % 未満に相当する、請求項 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 1 6】

前記ポリオレフィン、前記ブレンドの約 5 % ~ 約 5 0 % に相当する、請求項 1 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 1 7】

前記ポリオレフィン、前記ブレンドの約 5 % ~ 約 3 0 % に相当する、請求項 1 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

20

【請求項 1 8】

前記ポリオレフィン、前記ブレンドの約 1 0 % ~ 約 2 5 % に相当する、請求項 1 1 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 1 9】

前記ブレンドは、1 6 0 を上回る温度で押出されている、請求項 1 ~ 1 8 のいずれか 1 項に記載の押出ポリマーブレンド。

30

【請求項 2 0】

前記ブレンドは、1 7 0 を上回る温度で押出されている、請求項 1 9 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 2 1】

前記ブレンドは、1 8 0 を上回る温度で押出されている、請求項 1 9 に記載の押出ポリマーブレンド。

【請求項 2 2】

前記ブレンドは、2 0 0 を上回る温度で押出されている、請求項 1 9 に記載の押出ポリマーブレンド。

40

【請求項 2 3】

請求項 1 ~ 1 8 のいずれか 1 項に記載の押出ポリマーブレンドを含む、プラスチックフィルム。

【請求項 2 4】

請求項 2 3 に記載のプラスチックフィルムを含む、食品パッケージ。

【請求項 2 5】

50

請求項 1 ~ 18 のいずれか 1 項に記載の押出ポリマーブレンドを含む、射出成形されたプラスチック物品。

【請求項 26】

1 つ以上の非脂肪族ポリカーボネートポリマーと組み合わせて脂肪族ポリカーボネートを含む、ポリマーブレンドバリアフィルムであって、測定される酸素透過性が、体積加算モデルおよび Maxwell 1 1 モデルより選択される方法を使用して、前記ブレンドにおける前記ポリマーの酸素透過性値を使用して計算される予測された透過性から予想されるものの未満であることを特徴とする、ポリマーブレンドバリアフィルム。

10

【請求項 27】

前記測定される酸素透過性は、体積加算モデルから予測される値の 2 分の 1 未満である、請求項 26 に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

【請求項 28】

前記測定される酸素透過性が、体積加算モデルから予測される値の 5 分の 1 未満である、請求項 26 に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

【請求項 29】

前記測定される酸素透過性は、Maxwell 1 1 モデルから予測される値の 2 分の 1 未満である、請求項 26 に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

20

【請求項 30】

前記測定される酸素透過性は、Maxwell 1 1 モデルから予測される値の 5 分の 1 未満である、請求項 26 に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

【請求項 31】

前記脂肪族ポリカーボネートは、二酸化炭素および 1 つ以上のエポキシドのコポリマーを含む、請求項 26 に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

30

【請求項 32】

前記脂肪族ポリカーボネートは、ポリ(プロピレンカーボネート)；ポリ(エチレンカーボネート)；ポリ(プロピレンカーボネート)-コ-ポリ(エチレンカーボネート)；1 つ以上の追加の脂肪族ポリカーボネートとのポリ(プロピレンカーボネート)コ-ポリマー、1 つ以上の追加の脂肪族ポリカーボネートとのポリ(エチレンカーボネート)コ-ポリマー、上記のうちのいずれか 2 つ以上の物理的ブレンド、および上記のうちのいずれかを含むコポリマーから成る群より選択される、請求項 31 に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

【請求項 33】

ポリ(プロピレンカーボネート)を含む、請求項 26 に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

40

【請求項 34】

ポリ(エチレンカーボネート)を含む、請求項 26 に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

【請求項 35】

前記非脂肪族ポリカーボネートポリマーは、LDPE、LLDPE、HDPE、ポリプロピレン、ポリスチレン、ポリ塩化ビニル、ポリ(乳酸)、熱可塑性デンプン、ポリ(3

50

- ヒドロキシブチレート)、ポリ(3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(3-ヒドロキシブチレート-コ-3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(エチレンテレフタレート)(PET)、生分解性ポリエステル、例えば、ポリ(ブチレンアジペート)、ポリ(ブチレンサクシネート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-テレフタレート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-ブチレンサクシネート)、他の脂肪族および芳香族ポリエステル、ポリ(ビニルアルコール)、ポリ(酢酸ビニル)、エチレンビニルアルコールポリマー(EVOH)、ポリ(カプロラクトン)、ポリ(エチレングリコール)ジメタクリレート、ポリエステルアミド、または上記のいずれかの組み合わせから成る群より選択される、請求項26に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

10

【請求項36】

前記非脂肪族ポリカーボネートポリマーは、ポリエステルを含む、請求項26に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

【請求項37】

前記ポリエステルは、PLAを含む、請求項36に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

【請求項38】

前記ポリエステルは、PHBを含む、請求項36に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

20

【請求項39】

前記非脂肪族ポリカーボネートポリマーは、ポリオレフィンを含む、請求項26に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

【請求項40】

前記ポリオレフィンは、ポリエチレンを含む、請求項39に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

30

【請求項41】

前記ポリオレフィンは、ポリプロピレンを含む、請求項39に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

【請求項42】

前記ポリオレフィンは、LDPE、LLDPE、HDPE、ポリプロピレン、ポリスチレン、ポリ(乳酸)、熱可塑性デンプン、ポリ(3-ヒドロキシブチレート)、ポリ(3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(3-ヒドロキシブチレート-コ-3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(エチレンテレフタレート)(PET)、生分解性ポリエステル、例えば、ポリ(ブチレンアジペート)、ポリ(ブチレンサクシネート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-ブチレンサクシネート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-テレフタレート)、他の脂肪族および芳香族ポリエステル、ポリ(ビニルアルコール)、ポリ(酢酸ビニル)、エチレンビニルアルコールポリマー(EVOH)、ポリ(カプロラクトン)、ポリ(エチレングリコール)ジメタクリレート、ポリエステルアミド、ならびに上記のいずれかの組み合わせから成る群より選択される、請求項39に記載のポリマーブレンドバリアフィルム。

40

【請求項43】

前記ポリカーボネートは、ポリ(エチレンカーボネート)、ポリ(プロピレンカーボネート)、ポリ(エチレン-プロピレンカーボネート)ターポリマー、および上記のいずれ

50

かの組み合わせから成る群より選択される、請求項 4 2 に記載のポリマーブレンドフィルム。

【請求項 4 4】

前記ポリカーボネートは、ポリ（プロピレンカーボネート）を含み、平均で、前記ポリ（プロピレンカーボネート）において、隣接するモノマー単位の少なくとも 80% は、頭尾配向される、請求項 2 6 に記載のポリマーブレンドフィルム。

【請求項 4 5】

前記ポリカーボネートは、前記ポリカーボネートおよび前記ポリオレフィンの総重量の少なくとも約 10 重量%を成す、請求項 2 6 に記載のポリマーブレンドフィルム。

10

【請求項 4 6】

前記ポリオレフィン、前記ポリカーボネートおよび前記ポリオレフィンの総重量の少なくとも約 10 重量%を成す、請求項 2 6 に記載のポリマーブレンドフィルム。

【請求項 4 7】

a) 第 1 の酸素透過性を有するポリカーボネートと

b) 第 2 の酸素透過性を有するポリオレフィンと、

を含む、ポリマーブレンドフィルムであって、

前記ポリマーブレンドフィルムは、前記第 1 の酸素透過性の値および前記第 2 の酸素透過性の値を使用して、体積加算モデルから計算される酸素透過性値未満の第 3 の酸素透過性を有する、ポリマーブレンドフィルム。

20

【請求項 4 8】

前記第 3 の酸素透過性は、前記第 1 の酸素透過性の値および前記第 2 の酸素透過性の値を使用して、Maxwell モデルから計算される酸素透過性値未満である、請求項 4 7 に記載のポリマーブレンドフィルム。

【請求項 4 9】

前記ポリマーブレンドフィルムは、単一のポリマーブレンドから押出される、請求項 4 7 に記載のポリマーブレンドフィルム。

30

【請求項 5 0】

前記ポリマーブレンドフィルムは、約 100 ミル以下の厚さを有する、請求項 4 7 に記載のポリマーブレンドフィルム。

【請求項 5 1】

少なくとも 1 つの相溶化剤をさらに含む、請求項 4 7 に記載のポリマーブレンドフィルム。

40

【請求項 5 2】

前記ポリオレフィンは、LDPE、LLDPE、HDPE、ポリプロピレン、ポリスチレン、ポリ（乳酸）、熱可塑性デンプン、ポリ（3-ヒドロキシブチレート）、ポリ（3-ヒドロキシバレレート）、ポリ（3-ヒドロキシブチレート-コ-3-ヒドロキシバレレート）、ポリ（エチレンテレフタレート）（PET）、生分解性ポリエステル、例えば、ポリ（ブチレンアジペート）、ポリ（ブチレンサクシネート）、ポリ（ブチレンアジペート-コ-ブチレンサクシネート）、ポリ（ブチレンアジペート-コ-テレフタレート）、他の脂肪族および芳香族ポリエステル、ポリ（ビニルアルコール）、ポリ（酢酸ビニル）、エチレンビニルアルコールポリマー（EVOH）、ポリ（カプロラクトン）、ポリ（

50

エチレングリコール)ジメタクリレート、ポリエステルアミド、ならびに上記のいずれかの組み合わせから成る群より選択される、請求項47に記載のポリマーブレンドフィルム。

【請求項53】

前記ポリカーボネートは、ポリ(エチレンカーボネート)、ポリ(プロピレンカーボネート)、ポリ(エチレン-プロピレンカーボネート)ターポリマー、および上記のいずれかの組み合わせから成る群より選択される、請求項47に記載のポリマーブレンドフィルム。

10

【請求項54】

前記ポリカーボネートは、ポリ(プロピレンカーボネート)を含み、平均で、前記ポリ(プロピレンカーボネート)において、隣接するモノマー単位の少なくとも80%は、頭尾配向される、請求項47に記載のポリマーブレンドフィルム。

【請求項55】

前記ポリカーボネートは、前記ポリカーボネートおよび前記ポリオレフィンの総重量の少なくとも約10重量%を成す、請求項47に記載のポリマーブレンドフィルム。

【請求項56】

前記ポリオレフィン、前記ポリカーボネートおよび前記ポリオレフィンの総重量の少なくとも約10重量%を成す、請求項47に記載のポリマーブレンドフィルム。

20

【請求項57】

a) ポリ(プロピレンカーボネート)と、
b) ポリオレフィンと、
を含む、ポリマーブレンド。

【請求項58】

前記ポリマーブレンドは、ポリマーブレンドフィルムを形成するように押出される、単一のポリマーブレンドである、請求項57に記載のポリマーブレンド。

30

【請求項59】

前記ポリマーブレンドフィルムは、約100ミル以下の厚さを有する、請求項58に記載のポリマーブレンド。

【請求項60】

少なくとも1つの相溶化剤をさらに含む、請求項57に記載のポリマーブレンド。

【請求項61】

前記ポリオレフィンは、LDPE、LLDPE、HDPE、ポリプロピレン、ポリスチレン、ポリ(乳酸)、熱可塑性デンプン、ポリ(3-ヒドロキシブチレート)、ポリ(3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(3-ヒドロキシブチレート-コ-3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(エチレンテレフタレート)(PET)、生分解性ポリエステル、例えば、ポリ(ブチレンアジペート)、ポリ(ブチレンサクシネート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-テレフタレート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-ブチレンサクシネート)、他の脂肪族および芳香族ポリエステル、ポリ(ビニルアルコール)、ポリ(酢酸ビニル)、エチレンビニルアルコールポリマー(EVOH)、ポリ(カプロラクトン)、ポリ(エチレングリコール)ジメタクリレート、ポリエステルアミド、ならびに上記のいずれかの組み合わせから成る群より選択される、請求項57に記載のポリマーブレンド。

40

50

【請求項 6 2】

平均で、前記ポリ（プロピレンカーボネート）において、隣接するモノマー単位の少なくとも 80% は、頭尾配向される、請求項 5 7 に記載のポリマーブレンド。

【請求項 6 3】

前記ポリ（プロピレンカーボネート）は、前記ポリ（プロピレンカーボネート）および前記ポリオレフィンの総重量の少なくとも約 5 重量% を成す、請求項 5 7 に記載のポリマーブレンド。

10

【請求項 6 4】

前記ポリオレフィン、前記ポリ（プロピレンカーボネート）および前記ポリオレフィンの総重量の少なくとも約 5 重量% を成す、請求項 5 7 に記載のポリマーブレンド。

【請求項 6 5】

少なくとも 70 重量パーセントの脂肪族ポリカーボネートを含むプラスチックフィルムであって、前記フィルムは、少なくとも 100% の ASTM D 882 で測定される破断前伸長値を有することを特徴とする、プラスチックフィルム。

【請求項 6 6】

前記脂肪族ポリカーボネートは、ポリ（プロピレンカーボネート）およびポリ（エチレンカーボネート）のうちの 1 つ以上を含む、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

20

【請求項 6 7】

前記脂肪族ポリカーボネートは、ポリ（プロピレンカーボネート）を含む、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 6 8】

前記脂肪族ポリカーボネートは、ポリ（エチレンカーボネート）を含む、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

30

【請求項 6 9】

少なくとも 80 重量パーセントの脂肪族ポリカーボネートを含む、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 7 0】

少なくとも 85 重量パーセントの脂肪族ポリカーボネートを含む、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 7 1】

少なくとも 90 重量パーセントの脂肪族ポリカーボネートを含む、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

40

【請求項 7 2】

少なくとも 95 重量パーセントの脂肪族ポリカーボネートを含む、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 7 3】

1 つ以上の半結晶性ポリマーをさらに含む、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

50

【請求項 7 4】

1 つ以上のポリオレフィンポリマーをさらに含む、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 7 5】

約 0 . 5 から約 3 0 重量パーセントの 1 つ以上のポリオレフィンポリマーを含む、請求項 7 4 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 7 6】

約 0 . 5 から約 3 0 重量パーセントの 1 つ以上のポリオレフィンポリマーを含む、請求項 7 4 に記載のプラスチックフィルム。

10

【請求項 7 7】

約 1 から約 2 5 重量パーセントの 1 つ以上のポリオレフィンポリマーを含む、請求項 7 4 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 7 8】

約 1 から約 1 0 重量パーセントの 1 つ以上のポリオレフィンポリマーを含む、請求項 7 4 に記載のプラスチックフィルム。

20

【請求項 7 9】

約 2 から約 8 重量パーセントの 1 つ以上のポリオレフィンポリマーを含む、請求項 7 4 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 8 0】

約 5 重量パーセントの 1 つ以上のポリオレフィンポリマーを含む、請求項 7 4 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 8 1】

ポリオレフィンポリマーは、ポリエチレン、ポリプロピレン、およびポリエチレン - コプロピレンのうちの一つ以上を含む、請求項 7 4 ~ 8 0 のいずれか 1 項に記載のプラスチックフィルム。

30

【請求項 8 2】

ポリエチレンを含む、請求項 8 1 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 8 3】

前記ポリエチレンは、LDPEである、請求項 8 2 に記載のプラスチックフィルム。

40

【請求項 8 4】

ポリプロピレンを含む、請求項 8 1 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 8 5】

1 つ以上の相溶化剤をさらに含む、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 8 6】

前記フィルムは、延伸されている、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 8 7】

50

前記フィルムは、二軸延伸されている、請求項 8 6 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 8 8】

前記フィルムは、ブローフィルムプロセスによって作製されている、請求項 6 5 に記載のプラスチックフィルム。

【請求項 8 9】

延伸前の前記フィルムの A S T M 方法 D 8 8 2 で測定される前記破断前伸長値は、5 0 % 未満である、請求項 8 6 に記載のプラスチックフィルム。

10

【請求項 9 0】

少なくとも 7 0 重量パーセントの脂肪族ポリカーボネートを含むプラスチックフィルムであって、前記フィルムは、延伸されており、延伸前の A S T M D 8 8 2 を使用して測定される前記破断前伸長値は、5 0 % 未満であり、延伸後の A S T M D 8 8 2 を使用して測定される前記破断前伸長値は、1 0 0 % 超であることを特徴とする、プラスチックフィルム。

【請求項 9 1】

a) 脂肪族ポリカーボネートを提供するステップであって、前記脂肪族ポリカーボネートをフィルムに作製する時、前記フィルムが、5 0 % 未満の A S T M D 8 8 2 を使用して測定される固有の破断前伸長値を有することを特徴とする、ステップと、

20

b) 少なくとも 7 0 重量パーセントの脂肪族ポリカーボネートを含む混合物を提供するように、最大約 3 0 重量パーセントの半結晶性ポリマーを混和するステップと、

c) ステップ (b) の前記混合物からフィルムを形成するステップと、

d) 1 0 0 % 超の A S T M D 8 8 2 を使用して測定される破断前伸長値を有するフィルムを提供するように、ステップ (c) からの前記フィルムを延伸するステップと、を含む、方法。

30

【請求項 9 2】

ステップ (c) および (d) は、前記フィルムを作製するように、ブローフィルムプロセスを使用することによって、同時に実施される、請求項 9 1 に記載の方法。

【請求項 9 3】

前記フィルムを形成するステップは、前記フィルムを押出することを含む、請求項 9 1 に記載の方法。

【請求項 9 4】

前記フィルムを延伸するステップは、前記フィルムを一軸延伸することを含む、請求項 9 1 に記載の方法。

40

【請求項 9 5】

前記フィルムを延伸するステップは、前記フィルムを二軸延伸することを含む、請求項 9 1 に記載の方法。

【請求項 9 6】

前記脂肪族ポリカーボネートは、それが、3 5 超の T g を有することを特徴とする、請求項 9 1 に記載の方法。

50

【請求項 97】

前記脂肪族ポリカーボネートは、前記ポリカーボネート鎖が、平均で、98%超のカーボネート結合を含有することを特徴とする、請求項91に記載の方法。

【請求項 98】

前記脂肪族ポリカーボネートは、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む、請求項91~97のいずれか1項に記載の方法。

【請求項 99】

ステップ(b)で混和される前記半結晶性ポリマーは、ポリオレフィンを含む、請求項91に記載の方法。

10

【請求項 100】

前記ポリオレフィンは、LDPEを含む、請求項99に記載の方法。

【請求項 101】

ステップ(b)は、約1%から約10%の半結晶性ポリマーを混和することを含む、請求項91に記載の方法。

20

【請求項 102】

ステップ(a)において提供される前記脂肪族ポリカーボネートのみから作製されるフィルムの前記破断前伸長値、およびステップ(d)からの最終フィルムの前記破断前伸長値の比率は、2超である、請求項91に記載の方法。

【請求項 103】

前記比率は、3超である、請求項102に記載の方法。

【請求項 104】

前記比率は、5超である、請求項103に記載の方法。

30

【請求項 105】

前記比率は、10超である、請求項104に記載の方法。

【請求項 106】

脂肪族ポリカーボネートおよび約1~約10%のポリオレフィンのブレンドを含む組成物であって、ブレンドは、ブレンドされていない状態における前記脂肪族ポリカーボネートよりも少なくとも4倍高い、ASTM D882によって測定される破断前伸長値を有することを特徴とする、組成物。

40

【請求項 107】

前記脂肪族ポリカーボネートは、二酸化炭素、酸化プロピレン、および任意に1つ以上の追加のエポキシドとの間のコポリマーを含む、請求項106に記載の組成物。

【請求項 108】

前記脂肪族ポリカーボネートは、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む、請求項106に記載の組成物。

【請求項 109】

前記脂肪族ポリカーボネートは、98%超のカーボネート結合を含有することを特徴と

50

する、請求項 106 ~ 108 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 110】

前記脂肪族ポリカーボネートは、99%超のカーボネート結合を含有する、請求項 109 に記載の組成物。

【請求項 111】

前記脂肪族ポリカーボネートは、約 50,000 ~ 約 500,000 g/mol の Mn を有することを特徴とする、請求項 106 ~ 108 のいずれか 1 項に記載の組成物。

10

【請求項 112】

前記脂肪族ポリカーボネートは、約 50,000 ~ 約 250,000 g/mol の Mn を有する、請求項 111 に記載の組成物。

【請求項 113】

前記脂肪族ポリカーボネートは、約 120,000 ~ 約 220,000 g/mol の Mn を有する、請求項 111 に記載の組成物。

【請求項 114】

前記脂肪族ポリカーボネートは、2未満の多分散性指数を有することを特徴とする、請求項 106 ~ 108 のいずれか 1 項に記載の組成物。

20

【請求項 115】

前記脂肪族ポリカーボネートは、1.5未満の多分散性指数を有する、請求項 114 に記載の組成物。

【請求項 116】

前記脂肪族ポリカーボネートは、1.2未満の多分散性指数を有する、請求項 114 に記載の組成物。

30

【請求項 117】

前記脂肪族ポリカーボネートは、約 5 重量パーセント未満の環状カーボネートを含有することを特徴とする、請求項 106 ~ 108 のいずれか 1 項に記載の組成物。

【請求項 118】

前記脂肪族ポリカーボネートは、約 3 重量パーセント未満の環状カーボネートを含有する、請求項 114 に記載の組成物。

【請求項 119】

前記脂肪族ポリカーボネートは、実質的に環状カーボネートを含まない、請求項 117 に記載の組成物。

40

【請求項 120】

前記ポリオレフィン、ポリエチレンを含む、請求項 106 に記載の組成物。

【請求項 121】

前記ポリエチレンは、LDPEを含む、請求項 120 に記載の組成物。

【請求項 122】

前記ポリオレフィン、ポリプロピレンを含む、請求項 106 に記載の組成物。

50

【請求項 1 2 3】

前記組成物は、フィルムを成す、請求項 1 0 6 に記載の組成物。

【請求項 1 2 4】

前記フィルムは、延伸されている、請求項 1 2 3 に記載の組成物。

【請求項 1 2 5】

請求項 1 0 6 ~ 1 0 8、1 1 0、1 1 2 ~ 1 1 3、1 1 5 ~ 1 1 6、または 1 1 8 ~ 1 2 4 のいずれか 1 項に記載の組成物を含む、包装フィルム。

10

【請求項 1 2 6】

前記フィルムは、単層フィルムを含む、請求項 1 2 5 に記載の包装フィルム。

【請求項 1 2 7】

前記フィルムは、多層フィルムを含む、請求項 1 2 5 に記載の包装フィルム。

【請求項 1 2 8】

前記フィルムは、食品包装材料を成す、請求項 1 2 5 に記載の包装フィルム。

【発明の詳細な説明】

20

【技術分野】

【0 0 0 1】

関連出願の相互参照

本出願は、2010年10月11日出願の米国仮出願第61/392,010号、および2011年9月16日出願の米国仮出願第61/535,573に対する優先権を主張するものであり、これらの各々の全体の内容は、参照することにより、本明細書に組み込まれる。

【0 0 0 2】

政府支援

本発明は、米国エネルギー省によって認定される、Contract DE-FE00 02474の下、米国政府の支援によって成された。米国政府は、本発明において、一定の権利を有する。

30

技術分野

【0 0 0 3】

本発明は、ポリマー組成物およびポリマーブレンドの分野に関する。より具体的には、本発明は、改善された特性を有する、脂肪族ポリカーボネートブレンドに関する。

【背景技術】

【0 0 0 4】

包装といった消費者用途のために使用されるプラスチックのカーボンフットプリントを軽減することは、重要性を増しつつある。脂肪族ポリカーボネート(APC)は、それらが、排他的に化石燃料の原料に由来する従来のポリマーと比較して、非常に好ましい炭素プロファイルを有するため、この点において、魅力的な選択肢として認識される。これは、部分的に、ポリマーの質量のかなりの部分が廃棄物源に由来し得るCO₂に由来するという事実による。APCは、かなりの質量のポリマーを非化石燃料原料に置き換えるだけでなく、それらは、実際、そうでなければ、大気中に放出されるであろう廃棄物CO₂から産生され得る。より低い処理温度および生産におけるエネルギーの使用の低さといった、追加の要因は、排他的に石油または天然ガス原料に由来するポリマーと比較した時、これらのポリマーをさらにより好ましいものにする。脂肪族ポリカーボネートのライフサイクル分析はまた、それらが、生産のために大量のエネルギーおよび新鮮な水を必要とし、かつ、一部の例において、食品生産のために必要とされる同じ資源を競合する、バイオ系

40

50

ポリマーに勝るということを示す。

【0005】

これらの利点が著しい環境的利益を有するには、著しい体積のAPCを従来の石油化学ポリマーに置き換えることができる大きな市場の識別が必要である。これは、課題であり、エポキシドCO₂ポリマーが、40年以上にわたり既知である一方で、それらは、いずれの商品市場においても、広い用途を見出せていない。これは、それらの比較的乏しい構造のおよび熱的特性、ならびに最近まで、それらの高い費用によるものである。費用は、CO₂の共重合のための効率的なコバルト系触媒の識別を通じて、近年、低減されている。ポリマーの物理的特性の改善においても進歩を遂げている。コバルト触媒で作製されるAPCは、亜鉛またはアルミニウム触媒に基づく以前の材料よりも、はるかに良好な定義された構造を有する。より新しい材料は、非常に高い程度のCO₂組み込み、分子量(Mn)および分子量分布(PDI)の厳重な制御、ならびに環状カーボネート副生成物によるより低い汚染を呈する。

10

【0006】

これらの改善を包含するAPCは、より高いガラス転移温度、より良好な熱安定性、およびより低いガス透過性を有することが実証されている。これらの改善の全ては、包装材料としての使用といった大体積の消費者用途における、ポリマーの採用の可能性を増加させている。しかしながら、ポリマーは、依然として、それらの物理的強度および可撓性に関して、いくつかの欠点を有する。最も研究されているエポキシド-CO₂コポリマーである、ポリ(プロピレンカーボネート)は、かなり脆弱である傾向がある。これは、ポリマーが、エーテル結合(CO₂を伴わずに2つ以上のエポキシドの直接連鎖によって引き起こされる)を含まない、ならびに環状プロピレンカーボネート(cPC)(重合の間の副生成物として、または隣接するカーボネート結合上のヒドロキシル鎖末端の求核攻撃による、ポリマーの部分的分解によって形成される)を含まない、極めて純粋な形態で産生される場合に特に当てはまる。ある場合において、エーテル結合の存在は、ポリマーのTgを低下させ、より脆弱ではない材料を提供することができるが、これは、一般的に、強度、より低い熱安定性、および乏しいガスバリア特性の犠牲を伴う。同様に、残留する環状カーボネートが、ポリマーをより脆弱でないようにするために、可塑剤として作用することができる一方で、副生成物の存在は、望ましくない副次的影響があり、かつ、プロピレンカーボネートといった小分子は、包装材料から移動して、パッケージの内容物を汚染し得るため、ポリマーが食品接触のために使用される場合は、問題となる可能性がある。

20

30

【0007】

脂肪族ポリカーボネートを他の材料とブレンドして、それらの適用性を改善する試みが成されているが、これらのブレンドは、ポリ乳酸(PLA)、ポリヒドロキシブチレート(PHB)、デンプン等といった、バイオポリマーに焦点が当てられている。これらのブレンドは、依然として、ブレンドにおいて使用されるバイオポリマーの環境的不利点に苛まれ、多くの場合、依然として、わずかな処理および物理的特性しか有しない。

【0008】

ポリエチレン(PE)およびポリプロピレン(PP)といったポリオレフィン、消費者包装市場の大部分を構成する。これらのポリマーは、それらが、物理的特性、良好な処理特性、および低費用の優れた組み合わせを提供するため、人気がある。上で記載されるように、それらが遅れを取っている一領域は、それらのカーボンフットプリントである。脂肪族ポリカーボネートとのポリオレフィンのブレンドは、現在、当該技術分野において知られていない。

40

【0009】

酸素へのより低い透過性もまた、包装用途においては重要である。良好な酸素バリア特性は、食品および飲料のより少ない酸化の結果として、保存期間の増加につながり、それによって、より長い時間、味および品質を維持する。これは、包装産業における現在の傾向が、軽量包装を提供するように、それらの厚さを低減することによって、フィルムをダウンゲージすることであるため、特に重要である。このため、同等の厚さにおける透過性

50

、またははるかに低い厚さにおける同等の透過性における改善は、有意な商業的価値を有することができる。改善された酸素バリアフィルムは、肉、焼いた食品、スナック、直立パウチのジュース、製菓、ならびに多様な水分および酸素感受性の栄養補助食品ならびに健康および美容製品を含む、様々な食品および飲料を包装するために重要である。食品包装産業は、それらが、塩素化材料に対する環境的規制圧力によって、ポリ塩化ビニリデン（PVC）、および水分への感受性およびより高い湿度レベルにおけるより高い酸素透過性によって、エチレンビニルアルコール（EVOH）のような、現在の材料から遠ざかっているため、新しい選択肢を模索している。

【0010】

改善された物理的特性を有するAPC組成物に対する必要性が依然として存在する。これらの特有の環境的利益を犠牲にすることなく、APCの特性を改善するための方法は、特に価値があるであろう。本発明は、これらの必要性および他のものに対処する。

10

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

【0011】

本発明は、とりわけ、脂肪族ポリカーボネートおよびポリオレフィンのブレンドと、そのフィルムと、かかるブレンドおよびフィルムを作製する方法と、を提供する。ある実施形態において、かかるブレンドは、押出される。一部の実施形態において、提供される組成物は、改善された伸長特性を有する。一部の実施形態において、提供される組成物は、測定される酸素透過性が、ブレンドにおけるポリマーの酸素透過性値を使用して計算される予測された透過性から予想されるもの未満であることを特徴とする、1つ以上の非脂肪族ポリカーボネートポリマーと組み合わせた脂肪族ポリカーボネートを含む。

20

【0012】

定義

特定の官能基および化学用語の定義を、以下でより詳細に説明する。本発明の目的上、化学要素は、CAS式元素周期表（Periodic Table of the Elements, CAS version）、Handbook of Chemistry and Physics, 75th Ed.（内表紙）に従って識別され、特定の官能基は、概して、その中で説明されるように定義される。さらに、有機化学の一般原理、ならびに特定の官能性部分および反応性は、Organic Chemistry, Thomas Sorrell, University Science Books, Sausalito, 1999、Smith and March March's Advanced Organic Chemistry, 5th Edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001、Larock, Comprehensive Organic Transformations, VCH Publishers, Inc., New York, 1989、Carruthers, Some Modern Methods of Organic Synthesis, 3rd Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 1987において説明され、これらの各々の全体の内容は、参照することにより、本明細書に組み込まれる。

30

40

【0013】

本発明のある化合物は、1つ以上の不斉中心を含むことができ、このため、種々の立体異性体形態、例えば、エナンチオマーおよび/またはジアステレオマーにおいて存在することができる。このため、本発明の化合物およびその組成物は、個々のエナンチオマー、ジアステレオマー、または幾何学的異性体の形態であり得るか、または立体異性体の混合物の形態であり得る。ある実施形態において、本発明の化合物は、エナンチオピュアな化合物である。ある他の実施形態において、エナンチオマーまたはジアステレオマーの混合物が提供される。

【0014】

さらに、本明細書において説明されるある化合物は、別途示されない限り、ZまたはE

50

のいずれかの異性体として存在することができる、1つ以上の二重結合を有し得る。本発明は、さらに、他の異性体を実質的に含まない個々の異性体として、および、代替的に、種々の異性体の混合物、例えば、エナンチオマーのラセミ混合物として、化合物を包含する。上で言及される化合物自体に加えて、本発明はまた、1つ以上の化合物を含む組成物を包含する。

【0015】

本明細書において使用される際、「異性体」という用語は、任意のおよび全ての幾何学的異性体および立体異性体を含む。例えば、「異性体」は、本発明の範囲内にある、cisおよびtrans異性体、EおよびZ異性体、RおよびSエナンチオマー、ジアステレオマー、(d)異性体、(l)異性体、そのラセミ混合物、ならびにその他の混合物を含む。例えば、化合物は、一部の実施形態において、1つ以上の対応する立体異性体を実質的に含まずに提供され得、「立体化学的に富化された」とも称され得る。

10

【0016】

「エポキシド」という用語は、本明細書において使用される際、置換オキシランを指す。かかる置換オキシランは、一置換オキシラン、二置換オキシラン、三置換オキシラン、および四置換オキシランを含む。かかるエポキシドは、本明細書において定義されるように、さらに任意に置換されてもよい。ある実施形態において、エポキシドは、単一のオキシラン部分を含む。ある実施形態において、エポキシドは、2つ以上のオキシラン部分を含む。

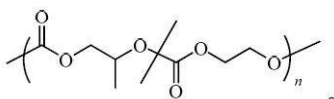
20

【0017】

「ポリマー」という用語は、本明細書において使用される際、高い相対分子質量の分子を指し、その構造は、実際または概念的に、低い相対分子質量の分子に由来する複数の単位の繰り返しを含む。ある実施形態において、ポリマーは、1つのモノマー種（例えば、ポリエチレンオキシド）のみから成る。ある実施形態において、ポリマーは、CO₂およびエポキシド（例えば、ポリ（エチレンカーボネート））に由来する実質的交互単位から成る。ある実施形態において、本発明のポリマーは、2つ以上の異なるエポキシドモノマーを組み込むコポリマー、ターポリマー、ヘテロポリマー、ブロックコポリマー、またはテーパー型ヘテロポリマーである。かかる高次ポリマーの構造的描写に関して、スラッシュによって分離される異なるモノマー単位の連鎖を示す慣例を、本明細書において使用することができる。

30

【化1-1】



これらの構造は、別途指定されない限り、描写されるいずれの比率の異なるモノマー単位も組み込むコポリマーも包含すると解釈されるものとする。この描写はまた、ランダム、テーパー型、ブロックコ-ポリマー、およびこれらのうちのいずれか2つ以上の組み合わせを表すことを意味し、別途指定されない限り、これらの全てが、示唆される。

【0018】

本明細書において使用される際、「触媒」という用語は、その存在が化学反応の割合および/もしくは程度を増加させるが、消費されない、またはそれ自体が永続的な化学変化を受けない、物質を指す。

40

【0019】

本明細書において使用される際、「結晶性」という用語は、示差走査熱量測定(DSC)もしくは同等の技術によって判定される際、一次転移または結晶性融点(T_m)を有する、ポリマーまたはポリマー組成物を指す。この用語は、「半結晶性」という用語と交換可能に使用することができる。非晶質ポリマーに関して、結晶性ポリマーまたはその組成物は、より高度な秩序構造を有する。一部の実施形態において、結晶性ポリマーは、材料を非晶質材料から区別するために使用することができる特性を有する。一部の実施形態において、結晶性材料は、融点を有するように、十分に結晶性である。

50

【 0 0 2 0 】

本明細書において使用される際、「結晶化可能な」という用語は、ある状態において主に非晶質であるが、本明細書において説明される条件および方法に供されると結晶化することができる、ポリマーまたはその組成物を指す。

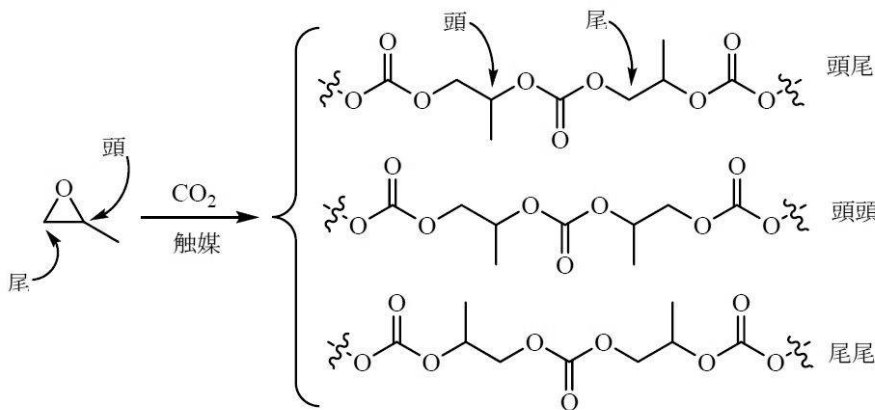
【 0 0 2 1 】

本明細書において使用される際、「非晶質」という用語は、示差走査熱量測定 (D S C) または同等の技術によって判定される際、融点を欠くポリマーを指す。

【 0 0 2 2 】

本明細書において使用される際、「頭尾」または「 H T 」という用語は、ポリマー鎖における、隣接する繰り返し単位の位置化学を指す。例えば、ポリ (プロピレンカーボネート) (P P C) の文脈において、頭尾という用語は、以下に描写される、3つの位置化学的可能性に基づく。

【 化 1 】



頭尾比率 (H : T) という用語は、全ての他の位置化学的可能性の合計に対する、頭尾結合の比率を指す。かかる用語は、ポリマーまたはポリマー組成物の位置規則性を説明および / または定量化するために使用することができる。ポリ (プロピレンカーボネート) の頭尾比率は、例えば、Lednor, et al. J. Chem. Soc., Chem. Comm. 1985, 598 - 599 によって説明されるように、 ^{13}C -NMR 分光法によって容易に判定することができる。ポリマー構造の描写に関して、モノマー単位の特定の位置化学的配向が、本明細書におけるポリマー構造の表現において示され得る一方で、これは、ポリマー構造を示される位置化学的配設に限定することを意図されないが、別途指定されない限り、描写されるものを含む全ての位置化学的配設、反対の位置化学、ランダムな混合物、イソタクチック材料、シンジオタクチック材料、ラセミ材料、および / またはエナンチオ富化された材料、ならびにこれらのうちのいずれかの組み合わせを包含すると解釈されるものとする。

【 0 0 2 3 】

「タクチシティ」という用語は、本明細書において使用される際、ポリマーまたはポリマー組成物における、プロピレン単位メチル基の配向の立体規則性を指す。かかる立体規則性は、位置規則性 (例えば、頭尾比率) から離して考慮することができるが、単純化するために、以下の定義は、同じ位置化学を有する隣接するプロピレン単位を考慮する。ポリマー骨格に関して、同じ相対立体化学的配向を有する、隣接する (即ち、カーボネート単位によって離間する) プロピレン単位からのメチル残基の対 (ダイアド) は、「メソ」 (m) と称される。反対の立体化学的構成のそれらは、「ラセミ」 (r) と称される。3つの隣接するプロピレン単位 (トリアド) が、同じ配向を有するメチル基を有する時、トリアドのタクチシティは、「mm」である。3つのプロピレン単位配列における2つの隣接するプロピレン単位が、同じ立体化学的配向を有し、その配向が、第3の単位の相対的構成とは異なる場合、トリアドのタクチシティは、「mr」である。中間のプロピレン単位が、いずれかの隣接プロピレンとは反対の構成を有する時、トリアドは、「rr」タク

チシティを有する。合計の鎖含有量におけるポリマー塩基中のトリアドの各タイプの割合を判定することができ、100で乗算すると、ポリマーにおいて見出されるそのタイプのパーセンテージを示す。タクチシティは、本明細書において使用される際、イソタクチック「mm」トリアドのパーセンテージである。

【0024】

「シンジオタクチック」という用語は、本明細書において使用される際、PPCポリマーまたはポリマー組成物を指し、プロピレン単位メチル基の立体化学的配向は、ポリマー鎖に沿って交互する。例えば、完全にシンジオタクチックなポリマーは、100%ラセミダイアドを有する。シンジオタクチックなポリマーまたはその組成物は、完全にシンジオタクチックである必要はないが、ある程度のシンジオタクチシティ（例えば、わずかにシンジオタクチック）を含有し得る。

10

【0025】

「イソタクチック」という用語は、本明細書において使用される際、PPCポリマーまたはポリマー組成物を指し、プロピレン単位メチル基の相対立体化学的配向は、ポリマー鎖に沿って同じである。例えば、完全にイソタクチックなポリマーは、100%メソダイアドを有する。イソタクチックポリマーまたはその組成物は、完全にイソタクチックである必要はないが、ある程度のイソタクチシティ（例えば、わずかにイソタクチック）を含有し得る。

【0026】

材料に関する「融点」という用語は、本明細書において使用される際、示差走査熱量測定(DSC)によって判定される主要なおよび二次的融解ピークの中で、より高いピークとして定義される。

20

【0027】

「バリアポリマー」という用語は、本明細書において使用される際、関心対象の分子に対して低い透過性を有する任意のポリマーとして定義される。一部の実施形態において、関心対象の分子は、酸素である。一部の実施形態において、関心対象の分子は、水である。

【0028】

「構造的ポリマー」という用語は、本明細書において使用される際、例えば、密度、硬度、剛性、衝撃抵抗、強度、および靱性といった、透過性以外の少なくとも1つの機械的または構造的特性に対する既定の値を有する任意のポリマーとして定義される。

30

【0029】

「ポリカーボネート」という用語は、本明細書において使用される際、カーボネート基を含有する任意のポリマーとして定義される。「脂肪族ポリカーボネート」という用語は、本明細書において使用される際、芳香族環を含有しない任意のポリカーボネートとして定義される。

【0030】

「ポリオレフィン」という用語は、本明細書において使用される際、一般式 C_nH_{2n} を有するモノマーとして、単純なオレフィンから産生される任意のポリマーとして定義される。

40

【0031】

「ハロ」および「ハロゲン」という用語は、本明細書において使用される際、フッ素(フルオロ、-F)、塩素(クロロ、-Cl)、臭素(ブロモ、-Br)、およびヨウ素(ヨード、-I)より選択される原子を指す。

【0032】

「脂肪族」または「脂肪族基」という用語は、本明細書において使用される際、直鎖(即ち、非分岐)、分岐、もしくは環状(縮合、架橋、およびスピロ縮合多環式を含む)であり得る、および完全に飽和であり得る、または1つ以上の不飽和単位を含有し得るが、芳香族ではない、炭化水素部分を表す。別途指定されない限り、脂肪族基は、1~40個の炭素原子を含有する。ある実施形態において、脂肪族基は、1~20個の炭素原子を含有する。

50

有する。ある実施形態において、脂肪族基は、3～20個の炭素原子を含有する。ある実施形態において、脂肪族基は、1～12個の炭素原子を含有する。ある実施形態において、脂肪族基は、1～8個の炭素原子を含有する。ある実施形態において、脂肪族基は、1～6個の炭素原子を含有する。一部の実施形態において、脂肪族基は、1～5個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、脂肪族基は、1～4個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、脂肪族基は、1～3個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、脂肪族基は、1または2個の炭素原子を含有する。好適な脂肪族基としては、線状または分岐アルキル、アルケニル、およびアルキニル基、ならびに(シクロアルキル)アルキル、(シクロアルケニル)アルキル、または(シクロアルキル)アルケニルといった、それらの混成物が挙げられるが、これらに限定されない。

10

【0033】

「ヘテロ脂肪族」という用語は、本明細書において使用される際、1つ以上の炭素原子が、独立して、酸素、硫黄、窒素、またはリンから成る群より選択される1つ以上の原子によって置き換えられる、脂肪族基を指す。ある実施形態において、1個から6個の炭素原子は、独立して、酸素、硫黄、窒素、またはリンのうちの1つ以上によって置き換えられる。ヘテロ脂肪族基は、置換または非置換、分岐または非分岐、環状または非環式であってもよく、飽和、不飽和、または部分的に不飽和基を含んでもよい。

【0034】

本明細書において使用される際、「二価C₁₋₈(もしくはC₁₋₃)飽和または不飽和、直鎖または分岐炭化水素鎖」という用語は、本明細書において定義されるように、直鎖または分岐鎖である、二価アルキル、アルケニル、およびアルキニル鎖を指す。

20

【0035】

「不飽和」という用語は、本明細書において使用される際、ある部分が、1つ以上の二重または三重結合を有するということを意味する。

【0036】

単独で、またはより大きな部分の一部として使用される、「脂環式」、「炭素環」、または「炭素環式」という用語は、3から12員を有する、本明細書において説明されるような、飽和、または部分的に不飽和の環状脂肪族単環式もしくは多環式環系を指し、脂肪族環系は、上で定義される、および本明細書において説明されるように、任意に置換される。脂環式基としては、これらに限定することなく、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロペンテニル、シクロヘキシル、シクロヘキセニル、シクロヘプチル、シクロヘプテニル、シクロオクチル、シクロオクテニル、ノルボルニル、アダマンチル、およびシクロオクタジエニルが挙げられる。一部の実施形態において、シクロアルキルは、3～6個の炭素を有する。「脂環式」、「炭素環」、または「炭素環式」という用語はまた、デカヒドロナフチルまたはテトラヒドロナフチルといった、1つ以上の芳香族または非芳香族環に縮合される脂肪族環を含み、ここでは、ラジカルまたは付着点が脂肪族環上にある。ある実施形態において、「3から7員の炭素環」という用語は、3から7員の飽和、または部分的に不飽和の単環式炭素環式環を指す。ある実施形態において、「3から8員の炭素環」という用語は、3から8員の飽和、または部分的に不飽和の単環式炭素環式環を指す。ある実施形態において、「3から14員の炭素環」および「C₃₋₁₄炭素環」という用語は、3から8員の飽和、もしくは部分的に不飽和の単環式炭素環式環、または7から14員の飽和、もしくは部分的に不飽和の多環式炭素環式環を指す。

30

40

【0037】

「アルキル」という用語は、本明細書において使用される際、単一の水素原子の除去によって、1～6個の炭素原子を含有する脂肪族部分に由来する、飽和、直鎖もしくは分岐鎖炭化水素ラジカルを指す。別途指定されない限り、アルキル基は、1～12個の炭素原子を含有する。ある実施形態において、アルキル基は、1～8個の炭素原子を含有する。ある実施形態において、アルキル基は、1～6個の炭素原子を含有する。一部の実施形態において、アルキル基は、1～5個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、アルキル基は、1～4個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、アルキル基は、1～

50

3個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、アルキル基は、1～2個の炭素原子を含有する。アルキルラジカルの例としては、メチル、エチル、*n*-プロピル、イソプロピル、*n*-ブチル、イソ-ブチル、*sec*-ブチル、*sec*-ペンチル、イソ-ペンチル、*tert*-ブチル、*n*-ペンチル、ネオペンチル、*n*-ヘキシル、*sec*-ヘキシル、*n*-ヘプチル、*n*-オクチル、*n*-デシル、*n*-ウンデシル、ドデシル等が挙げられるが、これらに限定されない。

【0038】

「アルケニル」という用語は、本明細書において使用される際、単一の水素原子の除去によって、少なくとも1つの炭素-炭素二重結合を有する、直鎖または分岐鎖の脂肪族部分に由来する、一価基を表す。別途指定されない限り、アルケニル基は、2～12個の炭素原子を含有する。ある実施形態において、アルケニル基は、2～8個の炭素原子を含有する。ある実施形態において、アルケニル基は、2～6個の炭素原子を含有する。一部の実施形態において、アルケニル基は、2～5個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、アルケニル基は、2～4個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、アルケニル基は、2～3個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、アルケニル基は、2個の炭素原子を含有する。アルケニル基としては、例えば、エテニル、プロペニル、ブテニル、1-メチル-2-ブテン-1-イル等が挙げられる。

10

【0039】

「アルキニル」という用語は、本明細書において使用される際、単一の水素原子の除去によって、少なくとも1つの炭素-炭素三重結合を有する、直鎖または分岐鎖の脂肪族部分に由来する、一価基を指す。別途指定されない限り、アルキニル基は、2～12個の炭素原子を含有する。ある実施形態において、アルキニル基は、2～8個の炭素原子を含有する。ある実施形態において、アルキニル基は、2～6個の炭素原子を含有する。一部の実施形態において、アルキニル基は、2～5個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、アルキニル基は、2～4個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、アルキニル基は、2～3個の炭素原子を含有し、一部の実施形態において、アルキニル基は、2個の炭素原子を含有する。代表的なアルキニル基としては、エチニル、2-プロピニル(プロパルギル)、1-プロピニル等が挙げられるが、これらに限定されない。

20

【0040】

「アルコキシ」という用語は、本明細書において使用される際、酸素原子を通じて親分子に付着される、先に定義されるような、アルキル基を指す。アルコキシの例としては、メトキシ、エトキシ、プロポキシ、イソプロポキシ、*n*-ブトキシ、*tert*-ブトキシ、ネオペントキシ、および*n*-ヘキソキシが挙げられるが、これらに限定されない。

30

【0041】

「アシル」という用語は、本明細書において使用される際、カルボニル含有官能性、例えば、 $-C(=O)R'$ を指し、式中、 R' は、水素、もしくは任意に置換された脂肪族、ヘテロ脂肪族、複素環、アリール、ヘテロアリール基であるか、または置換された(例えば、水素、もしくは脂肪族、ヘテロ脂肪族、アリール、もしくはヘテロアリール部分で)酸素、または窒素含有官能性(例えば、カルボン酸、エステル、もしくはアミド官能性を形成する)である。「アシルオキシ」という用語は、本明細書で使用される際、酸素原子を通じて親分子に付着するアシル基を指す。

40

【0042】

単独で、または「アラルキル」、「アルアルコキシ」、もしくは「アリールオキシアルキル」のように、より大きい部分の一部として使用される、「アリール」という用語は、単環式、および合計5から20環員を有する多環式環系を指し、系中の少なくとも1つの環は芳香族であり、系中の各環は、3から12環員を含有する。「アリール」という用語は、「アリール環」という用語と交換可能に使用することができる。本発明のある実施形態において、「アリール」は、1つ以上の置換基を担持し得る、フェニル、ピフェニル、ナフチル、アントラシル等が挙げられるが、これらに限定されない芳香族環系を指す。また、「アリール」という用語の範囲内には、それが、本明細書において使用される際、ベ

50

ンゾフラニル、インダニル、フタルイミジル、ナフトイミジル (naphthimidyl)、フェナントリイジニル (phenantridinyl)、またはテトラヒドロナフチル等といった、芳香族環が1つ以上の追加の環に縮合される基が含まれる。ある実施形態において、「6から10員のアリール」および「C₆₋₁₀アリール」という用語は、フェニル、または8から10員の多環式アリール環を指す。

【0043】

単独、またはより大きな部分の一部、例えば、「ヘテロアラルキル」、もしくは「ヘテロアルアルコキシ」として使用される、「ヘテロアリール」および「heteroar-」という用語は、5から14個の環原子、好ましくは5、6、または9個の環原子を有する；環状アレイ内で共有される6、10、または14の電子を有する；および炭素原子に加えて、1から5個のヘテロ原子を有する、基を指す。「ヘテロ原子」という用語は、窒素、酸素、または硫黄を指し、窒素または硫黄の任意の酸化された形態、および塩基性窒素の任意の四級化された形態を含む。ヘテロアリール基としては、これらに限定することなく、チエニル、フラニル、ピロリル、イミダゾリル、ピラゾリル、トリアゾリル、テトラゾリル、オキサゾリル、イソキサゾリル、オキサジアゾリル、チアゾリル、イソチアゾリル、チアジアゾリル、ピリジル、ピリダジニル、ピリミジニル、ピラジニル、インドリジニル、プリニル、ナフチリジニル、ベンゾフラニル、およびプテリジニルが挙げられる。「ヘテロアリール」および「heteroar-」はまた、本明細書において使用される際、ヘテロ芳香族環が1つ以上のアリール、脂環式、またはヘテロシクリル環に縮合される基を含み、ここでは、ラジカルまたは付着点がヘテロ芳香族環上にある。非限定的な例としては、インドリル、イソインドリル、ベンゾチエニル、ベンゾフラニル、ジベンゾフラニル、インダゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリル、キノリル、イソキノリル、シノリニル、フトラジニル、キナゾリニル、キノキサリニル、4H-キノリジニル、カルバゾリル、アクリジニル、フェナジニル、フェノチアジニル、フェノキサジニル、テトラヒドロキノリニル、テトラヒドロイソキノリニル、およびピリド[2,3-b]-1,4-オキサジン-3(4H)-オンが挙げられる。ヘテロアリール基は、単環式または二環式であってもよい。「ヘテロアリール」という用語は、「ヘテロアリール環」、「ヘテロアリール基」、または「ヘテロ芳香族」という用語と交換可能に使用することができ、これらの用語のいずれも、任意に置換される環を含む。「ヘテロアラルキル」という用語は、ヘテロアリールによって置換されるアルキル基を指し、ここでは、アルキルおよびヘテロアリール部分は、独立して、任意に置換される。ある実施形態において、「5から10員のヘテロアリール」という用語は、独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される1から3個のヘテロ原子を有する、5から6員のヘテロアリール環、または独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される1から4個のヘテロ原子を有する、8から10員の二環式ヘテロアリール環を指す。ある実施形態において、「5から12員のヘテロアリール」という用語は、独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される1から3個のヘテロ原子を有する、5から6員のヘテロアリール環、または独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される1から4個のヘテロ原子を有する、8から12員の二環式ヘテロアリール環を指す。

【0044】

本明細書において使用される際、「ヘテロ環」、「ヘテロシクリル」、「複素環式ラジカル」、および「複素環式環」という用語は、交換可能に使用され、飽和もしくは部分的に不飽和のいずれかであり、炭素原子に加えて、1つ以上の、好ましくは、上で定義されるように1から4個のヘテロ原子を有する、安定した5から7員の単環式または7~14員の多環式複素環式部分を指す。ヘテロ環の環原子に関して使用される時、「窒素」という用語は、置換された窒素を含む。一例として、酸素、硫黄、もしくは窒素より選択される0~3個のヘテロ原子を有する、飽和または部分的に不飽和の環において、窒素は、N(3,4-ジヒドロ-2H-ピロリルの場合のように)、NH(ピロリジニルの場合のように)、または*N R(N置換されたピロリジニルの場合のように)であってもよい。一部の実施形態において、「3から7員の複素環式」という用語は、独立して窒素、酸素、

10

20

30

40

50

もしくは硫黄より選択される 1 から 2 個のヘテロ原子を有する、3 から 7 員の飽和または部分的に不飽和の単環式複素環式環を指す。一部の実施形態において、「3 から 12 員の複素環式」という用語は、独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される 1 から 2 個のヘテロ原子を有する、3 から 8 員の飽和もしくは部分的に不飽和の単環式複素環式環、または独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される 1 ~ 3 個のヘテロ原子を有する、7 から 12 員の飽和もしくは部分的に不飽和の多環式複素環式環を指す。

【0045】

複素環式環は、任意のヘテロ原子または炭素原子においてそのペンダント基に付着して、安定した構造をもたらすことができ、環原子のいずれかは、任意に置換することができる。かかる飽和または部分的に不飽和の複素環式ラジカルの例としては、これらに限定することなく、テトラヒドロフラン、テトラヒドロチエニル、ピロリジニル、ピロリドニル、ピペリジニル、ピロリニル、テトラヒドロキノリニル、テトラヒドロイソキノリニル、デカヒドロキノリニル、オキサゾリジニル、ピペラジニル、ジオキサニル、ジオキサラニル、ジアゼピニル、オキサゼピニル、チアゼピニル、モルホリニル、およびキヌクリジニルが挙げられる。「ヘテロ環」、「ヘテロシクリル」、「ヘテロシクリル環」、「複素環式基」、「複素環式部分」、および「複素環式ラジカル」という用語は、本明細書において交換可能に使用され、インドリニル、3H-インドリル、クロマニル、フェナントリジニル、もしくはテトラヒドロキノリニルといった、ヘテロシクリル環が 1 つ以上のアリアル、ヘテロアリアル、または脂環式環に縮合される、基を含み、ここでは、ラジカルまたは付着点は、ヘテロシクリル環上にある。ヘテロシクリル基は、単環式または二環式であってもよい。「ヘテロシクリルアルキル」という用語は、ヘテロシクリルによって置換されるアルキル基を指し、ここでは、アルキルおよびヘテロシクリル部分は、独立して、任意に置換される。

10

20

【0046】

本明細書において使用される際、「部分的に不飽和」という用語は、少なくとも 1 つの二重または三重結合を含む環部分を指す。「部分的に不飽和」という用語は、複数の不飽和の部位を有する環を包含することが意図されるが、本明細書において定義される、アリアルまたはヘテロアリアル部分を含むことは意図されない。

【0047】

本明細書において説明される際、本発明の化合物は、「任意に置換された」部分を含有することができる。一般的に、「置換された」という用語は、「任意に」という用語が先行するかどうかにかかわらず、指定された部分の 1 つ以上の水素が、好適な置換基で置き換えられることを意味する。別途示されない限り、「任意に置換された」基は、基の各置換可能な位置において、好適な置換基を有することができ、任意の所与の構造における 2 つ以上の位置が、特定された基より選択される 2 つ以上の置換基で置換することができる時、置換基は、すべての位置において、同じであるか、または異なるかのいずれであってもよい。本発明によって想定される置換基の組み合わせは、安定した、または化学的に実現可能な化合物の形成をもたらすものが好ましい。「安定した」という用語は、本明細書において使用される際、それらの産生、検出、ならびに、ある実施形態においては、それらの回収、精製、および本明細書において開示される目的のうちの 1 つ以上に対する使用を可能にする条件に供される時、実質的に改変されない化合物を指す。

30

40

【0048】

「任意に置換された」基の置換可能な炭素原子上の好適な一価置換基は、独立して、ハロゲン； $-(CH_2)_{0-4}R^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}OR^\circ$ ； $-O-(CH_2)_{0-4}C(O)OR^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}CH(OR^\circ)_2$ ； $-(CH_2)_{0-4}SR^\circ$ ； R° で置換されてもよい $-(CH_2)_{0-4}Ph$ ； R° で置換されてもよい $-(CH_2)_{0-4}O(CH_2)_{0-1}Ph$ ； R° で置換されてもよい $-CH=CHPh$ ； $-NO_2$ ； $-CN$ ； $-N_3$ ； $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)_2$ ； $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)R^\circ$ ； $-N(R^\circ)C(S)R^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)NR^\circ_2$ ； $-N(R^\circ)C(S)NR^\circ_2$ ； $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)OR^\circ$ ； $-N($

50

R°) $N(R^\circ)$ $C(O)R^\circ$; - $N(R^\circ)$ $N(R^\circ)$ $C(O)NR^\circ_2$; - $N(R^\circ)$ $N(R^\circ)$ $C(O)OR^\circ$; - $(CH_2)_{0-4}C(O)R^\circ$; - $C(S)R^\circ$; - $(CH_2)_{0-4}C(O)OR^\circ$; - $(CH_2)_{0-4}C(O)N(R^\circ)_2$; - $(CH_2)_{0-4}C(O)SR^\circ$; - $(CH_2)_{0-4}C(O)OSiR^\circ_3$; - $(CH_2)_{0-4}OC(O)R^\circ$; - $OC(O)(CH_2)_{0-4}SR^\circ$ 、 $SC(S)SR^\circ$; - $(CH_2)_{0-4}SC(O)R^\circ$; - $(CH_2)_{0-4}C(O)NR^\circ_2$; - $C(S)NR^\circ_2$; - $C(S)SR^\circ$; - $SC(S)SR^\circ$ 、- $(CH_2)_{0-4}OC(O)NR^\circ_2$; - $C(O)N(OR^\circ)R^\circ$; - $C(O)C(O)R^\circ$; - $C(O)CH_2C(O)R^\circ$; - $C(NOR^\circ)R^\circ$; - $(CH_2)_{0-4}SSR^\circ$; - $(CH_2)_{0-4}S(O)_2R^\circ$; - $(CH_2)_{0-4}S(O)_2OR^\circ$; - $(CH_2)_{0-4}OS(O)_2R^\circ$; - $S(O)_2NR^\circ_2$; - $(CH_2)_{0-4}S(O)R^\circ$; - $N(R^\circ)S(O)_2NR^\circ_2$; - $N(R^\circ)S(O)_2R^\circ$; - $N(OR^\circ)R^\circ$; - $C(NH)NR^\circ_2$; - $P(O)_2R^\circ$; - $P(O)R^\circ_2$; - $OP(O)R^\circ_2$; - $OP(O)(OR^\circ)_2$; SiR°_3 ; - $(C_{1-4}$ 直鎖もしくは分岐アルキレン) $O-N(R^\circ)_2$; または - $(C_{1-4}$ 直鎖もしくは分岐アルキレン) $C(O)O-N(R^\circ)_2$ であり、各 R° は、以下で定義されるように置換されてもよく、独立して水素、 C_{1-8} 脂肪族、 $-CH_2Ph$ 、 $-O(CH_2)_{0-1}Ph$ 、または独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する、5~6 員の飽和、部分的に不飽和、もしくはアリアル環であるか、または、上の定義にかかわらず、 R° の 2 つの独立した出現は、それらの介在する原子 (複数を含む) と一緒になって、以下で定義されるように置換されてもよい、独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する、3~12 員の飽和、部分的に不飽和、またはアリアル単環式もしくは多環式環を形成する。

【0049】

R° (R° の 2 つの独立した出現とそれらの介在する原子が一緒になって形成される環) 上の好適な一価置換基は、独立して、ハロゲン、 $-(CH_2)_{0-2}R$ 、 $-(CH_2)_{0-2}OH$ 、 $-(CH_2)_{0-2}OR$ 、 $-(CH_2)_{0-2}CH(OR)_2$; $-O(CH_2)_{0-2}R$ 、 $-CN$ 、 $-N_3$ 、 $-(CH_2)_{0-2}C(O)R$ 、 $-(CH_2)_{0-2}C(O)OH$ 、 $-(CH_2)_{0-2}C(O)OR$ 、 $-(CH_2)_{0-4}C(O)N(R^\circ)_2$; $-(CH_2)_{0-2}SR$ 、 $-(CH_2)_{0-2}SH$ 、 $-(CH_2)_{0-2}NH_2$ 、 $-(CH_2)_{0-2}NHR$ 、 $-(CH_2)_{0-2}NR_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SiR_3$ 、 $-OSiR_3$ 、 $-C(O)SR$ 、 $-(C_{1-4}$ 直鎖もしくは分岐アルキレン) $C(O)OR$ 、または $-SSR$ であり、各 R は非置換であるか、または、「ハロ」が先行する場合、1 つ以上のハロゲンでのみ置換され、独立して、 C_{1-4} 脂肪族、 $-CH_2Ph$ 、 $-O(CH_2)_{0-1}Ph$ 、または独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する、5~6 員の飽和、部分的に不飽和、もしくはアリアル環より選択される。 R° の飽和炭素原子上の好適な二価置換基は、 $=O$ および $=S$ を含む。

【0050】

「任意に置換された」基の飽和炭素原子上の好適な二価置換基としては、以下が挙げられ： $=O$ 、 $=S$ 、 $=NNR^*_2$ 、 $=NNHC(O)R^*$ 、 $=NNHC(O)OR^*$ 、 $=NNHS(O)_2R^*$ 、 $=NR^*$ 、 $=NOR^*$ 、 $-O(C(R^*_2))_{2-3}O-$ 、または $-S(C(R^*_2))_{2-3}S-$ 、 R^* の各独立した出現は、水素、以下で定義されるように置換されてもよい C_{1-6} 脂肪族、または独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する、非置換の 5~6 員の飽和、部分的に不飽和、もしくはアリアル環より選択される。「任意に置換された」基の近接の置換可能な炭素に結合される好適な二価置換基としては、 $-O(CR^*_2)_{2-3}O-$ が挙げられ、 R^* の各独立した出現は、水素、以下で定義されるように置換されてもよい C_{1-6} 脂肪族、または独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する、非置換の 5~6 員の飽和、部分的に不飽和、もしくはアリアル環より選択される。

【0051】

10

20

30

40

50

R^{*}の脂肪族基上の好適な置換基としては、ハロゲン、-R、-(ハロR)、-OH、-OR、-O(ハロR)、-CN、-C(O)OH、-C(O)OR、-NH₂、-NHR、-NR₂、または-NO₂が挙げられ、各Rは非置換であるか、または「ハロ」が先行する場合、1つ以上のハロゲンでのみ置換され、独立して、C₁₋₄脂肪族、-CH₂Ph、-O(CH₂)₀₋₁Ph、または独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される0~4個のヘテロ原子を有する、5~6員の飽和、部分的に不飽和、もしくはアリール環である。

「任意に置換された」基の置換可能な窒素上の好適な置換基としては、-R[†]、-NR[†]₂、-C(O)R[†]、-C(O)OR[†]、-C(O)C(O)R[†]、-C(O)CH₂C(O)R[†]、-S(O)₂R[†]、-S(O)₂NR[†]₂、-C(S)NR[†]₂、-C(NH)NR[†]₂、または-N(R[†])S(O)₂R[†]が挙げられ、各R[†]は、独立して、水素、以下で定義されるように置換されてもよいC₁₋₆脂肪族、非置換の-OPh、または独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される0~4個のヘテロ原子を有する、非置換の5~6員の飽和、部分的に不飽和、もしくはアリール環であるか、または上の定義にかかわらず、R[†]の2つの独立した出現は、それらの介在する原子(複数を含む)と一緒にあって、独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される0~4個のヘテロ原子を有する、非置換の3~12員の飽和、部分的に不飽和、もしくはアリール単環式または二環式環を形成する。

【0052】

R[†]の脂肪族基上の好適な置換基は、独立して、ハロゲン、-R、-(ハロR)、-OH、-OR、-O(ハロR)、-CN、-C(O)OH、-C(O)OR、-NH₂、-NHR、-NR₂、または-NO₂であり、各Rは非置換であるが、または「ハロ」が先行する場合、1つ以上のハロゲンでのみ置換され、独立して、C₁₋₄脂肪族、-CH₂Ph、-O(CH₂)₀₋₁Ph、または独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される0~4個のヘテロ原子を有する、5~6員の飽和、部分的に不飽和、もしくはアリール環である。

【0053】

置換基が本明細書において説明される時、「ラジカル」または「任意に置換されたラジカル」という用語が時折使用される。この文脈において、「ラジカル」は、置換基が結合される構造への付着のための利用可能な位置を有する、部分または官能基を意味する。一般的に、置換基が、置換基よりもむしろ独立した中立分子であった場合、付着点は、水素原子を担持するであろう。このため、この文脈において、「ラジカル」または「任意に置換されたラジカル」という用語は、「基」または「任意に置換された基」と交換可能である。

【図面の簡単な説明】

【0054】

【図1】200でのPPCの2つの試料の経時的な質量を示す。

【図2】PPCおよびLLDPEのポリマーブレンドのSEM顕微鏡写真を示す。

【図3】PPCおよびHDPEのポリマーブレンドのSEM顕微鏡写真を示す。

【発明を実施するための形態】

【0055】

ある実施形態の詳細な説明

多層生成物をもたらす共押出または積層は、典型的に、包装用途のために高いバリア特性を有するフィルムを得るために使用される。3から5つの層、および時折最大9つの層が、所望の特性を有するフィルムを産生するために使用される。しかしながら、多層生成物は、高い資本投資、および複雑な処理制御を必要とする。本発明は、より高いバリア特性を有する単一のブレンドポリマーが、包装の複雑性を有意に低減することができるが、EVOHのような一般的に使用される酸素バリアポリマーの低い水分感受性は、それらが2つのポリオレフィン層間に埋め込まれることを必要とするという認識を包含する。

【0056】

10

20

30

40

50

一部の実施形態において、本発明は、エポキシド/CO₂コポリマーと、1つ以上のポリオレフィンとを含む、押出ポリマーブレンドを提供する。これらの新規材料は、これまで、当該技術分野において知られていなかった。理論によって制約されること、またはそれにより本発明の範囲を限定することなく、これは、ポリオレフィンが処理および押出される処理温度との、既存の商業的に利用可能な脂肪族ポリカーボネートの不適合性による可能性があると考えられる。したがって、本発明は、とりわけ、以前に知られている問題源の識別を提供する。ある実施形態において、本発明は、改善された熱処理特性を有する脂肪族ポリカーボネート組成物を含む、押出ポリマーブレンドを提供する。

【0057】

一部の実施形態において、本発明は、1つ以上の追加のポリマーとのAPCのブレンドを包含し、APCは、ブレンドの少なくとも70重量パーセントを成す。ある実施形態において、本発明のブレンドは、少なくとも80、少なくとも90、または少なくとも95重量パーセントのAPCを含む。ある実施形態において、本発明のブレンドはまた、最大約30重量パーセントの1つ以上の結晶性または半結晶性ポリマーを含む。ある実施形態において、本発明のブレンドは、約20未満、約10未満、または約5重量パーセント未満の結晶性または半結晶性ポリマーを含む。ある実施形態において、本発明のブレンドは、約1~約10重量パーセントの結晶性または半結晶性ポリマーを含む。ある実施形態において、本発明のブレンドは、約5重量パーセントの結晶性または半結晶性ポリマーを含む。

10

【0058】

ある実施形態において、本発明は、少量の結晶性または半結晶性ポリマーが、APCとブレンドされる場合、非晶質APCを含むフィルムを延伸することは、フィルムの伸長特性を大幅に改善することができるという認識を包含する。かかる改善が、主にもしくは完全に半結晶性または結晶性のポリマーから作製されるフィルムに関して既知である一方で、完全に非晶質のポリマーは、二軸延伸および関連する方法から利益を得ないことが既知であるため、主に非晶質の脂肪族ポリカーボネートを含むフィルムの伸長特性が、本方法によって改善されるはずであるということは、極めて予想外である。

20

【0059】

ある実施形態において、本発明は、ポリオレフィンといった半結晶性ポリマーとのAPCのブレンドを含む、組成物を提供し、APCは、少なくとも70、少なくとも80、少なくとも90、または少なくとも95の重量パーセントの非晶質APC、および30未満、20未満、10未満、または5重量パーセント未満の半結晶性ポリマーを含む。ある実施形態において、かかる組成物は、100%超のEB測定値を有する。ある実施形態において、本発明は、かかる組成物から作製されるフィルムを包含する。ある実施形態において、本発明は、かかる組成物を含む包装材料を包含する。

30

【0060】

別の態様において、本発明は、APC組成物のEBを増加させる方法を包含する。ある実施形態において、かかる方法は、APCを提供するステップと、30重量パーセント以下の半結晶性ポリマーとAPCをブレンドするステップと、ブレンドされたポリマー混合物を延伸するステップと、を含む。

40

【0061】

ある実施形態において、本発明のブレンドは、ブレンドされていないAPCと比較して、予想外に増加したE_B値を有する。かかる増加したE_B値は、ある実施形態のブレンドにおける比較的少量の他のポリマーを考えると、特に予想外である。ある実施形態において、本発明のAPCブレンドは、それらが、対応するブレンドされていないAPC組成物よりも少なくとも3倍大きいE_B値を有することを特徴とする。ある実施形態において、ブレンドのE_B値は、ブレンドされていないAPCの5倍超、8倍超、または10倍超である。

【0062】

ある実施形態において、ブレンドのE_B値は、ブレンドされていないポリマー構成要素

50

の E_B 値の加重平均を約 2 倍以上超過する。例えば、ブレンドが、20%の E_B 値を有する 90%の APC と、200%の E_B 値を有する 10%の LDPE 組成物とから成る場合、90:10の混合物に基づく E_B の加重平均は 38%である一方で、本発明の上で説明される実施形態に従うブレンドは、少なくとも約 76%の E_B を有するであろう。ある実施形態において、ブレンドの E_B 値は、ブレンドされていないポリマー構成要素の E_B 値の加重平均を、約 3 倍以上、約 4 倍以上、約 5 倍以上、または約 10 倍以上超過する。ある実施形態において、ブレンドの E_B 値は、ブレンドされていないポリマー構成要素のいずれかの E_B 値を超過する。

【0063】

ある実施形態において、本発明の APC ブレンドは、それらが、ブレンドの E_B を増加させる延伸プロセスに供されていることを特徴とする。ある実施形態において、延伸されたブレンドの E_B 値は、対応する延伸されていないブレンドよりの 2 倍超、3 倍超、5 倍超、または 10 倍超である。ある実施形態において、延伸されたブレンドの E_B 値は、同じ延伸に供される時、対応する純粋な APC の 2 倍超、3 倍超、5 倍超、または 10 倍超である。

10

【0064】

ある実施形態において、本発明のブレンドに存在する APC は、本明細書とともに提供される付録 1、付録 2、または付録 3 に開示されるもののうちの 1 つである。これらの付録における定義は、独立して読まれるものとするということが、理解されるものとする。例えば、一方の付録における R 基の定義は、他方の付録または本明細書の本文における、対応して指定される R 基とは異なり得、かかる場合において、定義は、独立した、かつ各付録に対して特異的であると見なされるものとする。そのようなものとして、付録における R 基に対する限定は、本明細書に提供されるいかなる定義も限定することを必ずしも意図せず、逆もまた同様である。

20

【0065】

一部の実施形態において、本発明は、ブレンドのバリア特性（例えば、酸素バリアまたは水バリア）が、個々の構成要素のバリア特性の加重平均に基づいて予測されるであろうものよりも、有意に良好であることを特徴とする、第 2 のポリマーとの脂肪族ポリカーボネートの混合物を提供する。

【0066】

ある実施形態において、低い酸素透過性を有するポリマー、および構造的ポリマーは、構造的ポリマーよりも低い酸素透過性、およびバリアポリマーよりも良好な構造的特性を有する、ポリマーブレンドに組み合わせられる。ある実施形態において、バリアポリマーは、脂肪族ポリカーボネートである。バリアポリマーは、より好ましくは、二酸化炭素および 1 つ以上のエポキシドに由来する、脂肪族ポリカーボネートである。一部の実施形態において、バリアポリマーは、ポリ（プロピレンカーボネート）である。一部の実施形態において、バリアポリマーは、ポリ（エチレンカーボネート）である。一部の実施形態において、バリアポリマーは、ポリ（エチレン - コ - プロピレンカーボネート）である。構造的ポリマーは、好ましくは、ポリオレフィンである。一部の実施形態において、構造的ポリマーは、低密度ポリエチレン（LDPE）である。一部の実施形態において、構造的ポリマーは、線状低密度ポリエチレン（LLDPE）である。一部の実施形態において、構造的ポリマーは、高密度ポリエチレン（HDPE）である。一部の実施形態において、構造的ポリマーは、ポリプロピレン（PP）である。一部の実施形態において、ポリマーブレンドは、食品包装における使用のためのフィルムである。

30

40

【0067】

ある実施形態において、本発明は、低減された脆弱性を有する APC 組成物を提供する。ポリマーの可撓性は、しばしば、破断までの伸長（ E_B ）を測定することによって評価される。これは、典型的に、バルク組成物に関しては ASTM D 638、またはフィルムに関しては ASTM D 882 を使用して測定され、元の試料の長さのパーセンテージとして報告される。多数の文献報告において、PPC は、50%未満の、およびしばしば

50

数パーセントと低いEB値を示す。本出願者は、予想外に改善されたEB特性を有する、比較的少量の半結晶性ポリマー（例えば、LDPEといったポリオレフィン）を組み込む、APCのブレンドを作製することが可能であることを見出した。ある実施形態において、特性における改善は、ブレンドから作製されるフィルムを延伸した後に観察される。ある実施形態において、APCのみから作製される類似のフィルムに対する、ブレンドされ、延伸されたフィルムのEBの比率は、3：1超であり、一部の場合においては、10：1よりも大きい。

【0068】

本開示が、提供される組成物の1つの特性を説明する場合、本開示は、かかる個々の特性を、単独で、および本明細書において説明される1つ以上の他の特性と組み合わせて有する組成物を包含するということが明らかであろう。

10

【0069】

I) 脂肪族ポリカーボネート

一部の実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネートを、1つ以上のポリオレフィンポリマーと組み合わせて含む、押出ポリマーブレンドを提供する。ある実施形態において、脂肪族ポリカーボネートは、1つ以上のエポキシドとの二酸化炭素の共重合に由来する。ある実施形態において、脂肪族ポリカーボネートは、ポリ(プロピレンカーボネート)(PPC)、ポリ(エチレンカーボネート)PEC、ポリ(プロピレンカーボネート)-コ-ポリ(エチレンカーボネート)、およびこれらのうちのいずれかの混合物から成る群より選択される。

20

【0070】

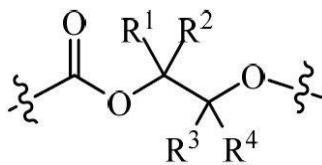
ある実施形態において、脂肪族ポリカーボネート(APC)は、押出ポリマーブレンドにおけるポリオレフィンの量にほぼ等しい、またはそれ未満の量で存在する。ある他の実施形態において、押出ポリマーブレンドは、ポリオレフィンよりも多いAPCを含有する。一部の実施形態において、ブレンドは、2つ以上のポリオレフィン材料を含む。一部の実施形態において、ブレンドは、相溶化剤、処理添加剤、顔料、充填剤等といった、追加の構成要素をさらに含む。

【0071】

ある実施形態において、本発明のAPCブレンドは、以下の構造を有する一次繰り返し単位を有する1つ以上のAPCを含み、

30

【化2】



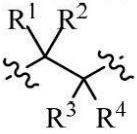
式中、R¹、R²、R³、およびR⁴は、ポリマー鎖における各出現において、独立して、-H、フッ素、任意に置換されたC₁₋₄₀脂肪族基、任意に置換されたC₁₋₂₀ヘテロ脂肪族基、および任意に置換されたアリール基から成る群より選択され、R¹、R²、R³、およびR⁴のいずれか2つ以上は、任意に、介在する原子と一緒にあって、任意に1つ以上のヘテロ原子を含有する、1つ以上の任意に置換された環を形成することができる。

40

【0072】

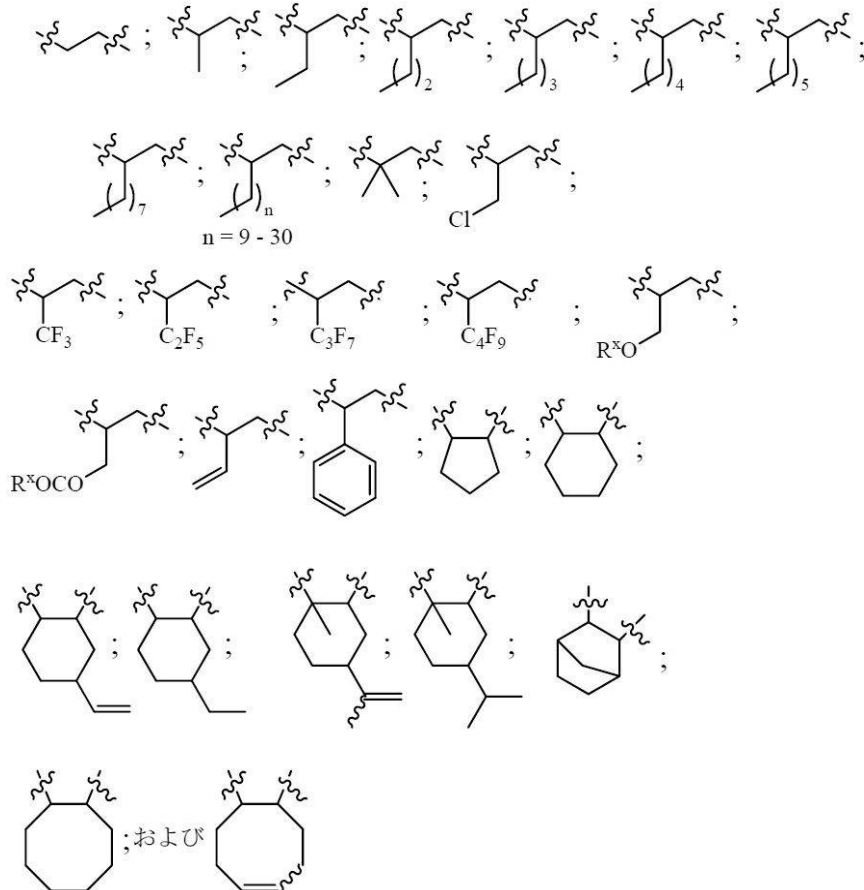
ある実施形態において、本明細書において説明されるブレンドに組み込まれるAPCポリマーの繰り返し単位における各

【化 1 - 2】



は、独立して、以下から成る群より選択され、

【化 3】



10

20

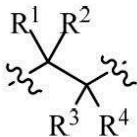
30

式中、各 R^x は、独立して、 C_{1-20} 脂肪族、 C_{2-20} ヘテロ脂肪族、3 から 14 員の炭素環式、6 から 10 員のアリール、5 から 10 員のヘテロアリール、および 3 から 12 員の複素環式から成る群より選択される、任意に置換された基である。

【0073】

ある実施形態において、本明細書において説明されるブレンドに組み込まれる APC ポリマーの繰り返し単位における各

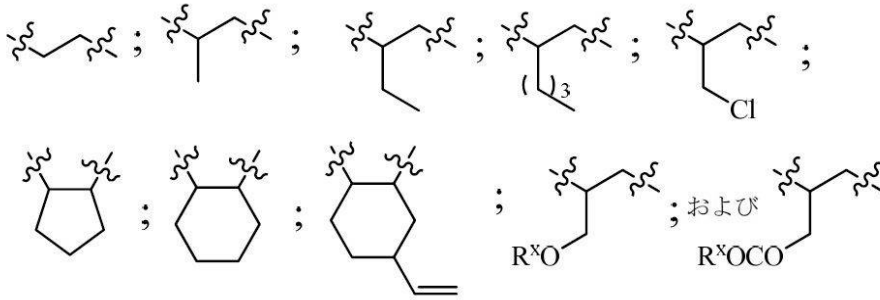
【化 1 - 3】



は、独立して、以下から成る群より選択され、

40

【化 4】



10

式中、 R^x は、上で定義されるとおりであり、本明細書において、クラスおよびサブクラスで説明される。

【0074】

ある実施形態において、本明細書において説明されるブレンドに存在する APC は、ポリ(プロピレンカーボネート)(PPC)、ポリ(エチレンカーボネート)(PEC)、ポリ(ブチレンカーボネート)(PBC)、ポリ(シクロヘキセンカーボネート)(PCHC)、ポリ(1,2ヘキセンカーボネート)(PHC)、 CO_2 およびエピクロルヒドリンまたはグリシドールエーテルまたはエステルのコポリマー、ならびにこれらのうちのいずれか2つ以上の混合物またはコポリマーから成る群より選択される。ある実施形態において、本明細書において説明されるブレンドに存在する APC は、PPC を含む。ある実施形態において、本明細書において説明されるブレンドに存在する APC は、PEC を含む。

20

【0075】

ある実施形態において、本明細書において説明されるブレンドに存在する APC は、二酸化炭素および1つ以上のエポキシドのコポリマーを含む。ある実施形態において、APC は、二酸化炭素およびエチレンオキシドのコポリマーを含む。ある実施形態において、APC は、二酸化炭素およびプロピレンオキシドのコポリマーを含む。ある実施形態において、APC は、二酸化炭素およびシクロヘキセンオキシドのコポリマーを含む。ある実施形態において、APC は、二酸化炭素およびシクロペンテンオキシドのコポリマーを含む。ある実施形態において、APC は、二酸化炭素および3-ビニルシクロヘキサンオキシドのコポリマーを含む。

30

【0076】

一部の実施形態において、本明細書において説明されるブレンドに存在する APC は、エチレンオキシド、1,2-ブテンオキシド、2,3-ブテンオキシド、シクロヘキセンオキシド、3-ビニルシクロヘキセンオキシド、エピクロルヒドリン、グリシジルエステル、グリシジルエーテル、スチレンオキシド、および高級アルファオレフィンのエポキシドから成る群より選択される、1つ以上の追加のエポキシドとともに、二酸化炭素および酸化プロピレンのコポリマーを含む。ある実施形態において、かかるターポリマーは、1つ以上の追加のエポキシドに由来するより少ない量の繰り返し単位とともに、酸化プロピレンに由来する繰り返し単位の大部分を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、約50%から約99.5%の酸化プロピレン由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、60%超の酸化プロピレン由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、75%超の酸化プロピレン由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、80%超の酸化プロピレン由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、85%超の酸化プロピレン由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、90%超の酸化プロピレン由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、95%超の酸化プロピレン由来の繰り返し単位を含有する。

40

【0077】

ある実施形態において、本明細書において説明されるブレンドに存在する APC は、酸

50

化プロピレン、1,2-ブテンオキシド、2,3-ブテンオキシド、シクロヘキセンオキシド、3-ビニルシクロヘキセンオキシド、エピクロルヒドリン、グリシジルエステル、グリシジリエーテル、スチレンオキシド、および高級アルファオレフィンのエポキシドから成る群より選択される、1つ以上の追加のエポキシドとともに、二酸化炭素およびエチレンオキシドのターポリマーを含む。ある実施形態において、かかるターポリマーは、1つ以上の追加のエポキシドに由来するより少ない量の繰り返し単位とともに、エチレンオキシドに由来する繰り返し単位の大部分を含む。ある実施形態において、ターポリマーは、約50%から約99.5%エチレンオキシド由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、約60%超のエチレンオキシド由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、75%超のエチレンオキシド由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、80%超のエチレンオキシド由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、85%超のエチレンオキシド由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、90%超のエチレンオキシド由来の繰り返し単位を含有する。ある実施形態において、ターポリマーは、95%超のエチレンオキシド由来の繰り返し単位を含有する。

10

20

30

40

50

【0078】

ある実施形態において、本発明のブレンドに存在するAPCは、例えば、組成物における鎖あたりの繰り返し単位の平均数を表すそれらの重合度(DP)によって表されるように、比較的高い分子量を有する。好ましくは、APCの重合度は、鎖が高い交絡度を有するように十分に高い。ある実施形態において、APCは、約100を上回るDPを有することを特徴とする。ある実施形態において、APCは、約200を上回るDPを有することを特徴とする。ある実施形態において、APCは、約500を上回るDPを有することを特徴とする。ある実施形態において、APCは、約1,000を上回るDPを有することを特徴とする。ある実施形態において、APCは、約500~約5,000のDPを有することを特徴とする。ある実施形態において、APCは、約1,000~約4,000のDPを有することを特徴とする。ある実施形態において、APCは、約1,000~約3,000のDPを有することを特徴とする。ある実施形態において、APCは、約5,000未満のDPを有することを特徴とする。

【0079】

ある実施形態において、ブレンドがPPCを含む場合、PPCは、それが、約40,000g/molを上回る数平均分子量(Mn)を有することを特徴とする。ある実施形態において、PPCは、それが、約80,000g/molを上回るMnを有することを特徴とする。ある実施形態において、PPCは、それが、約100,000~約500,000g/molのMnを有することを特徴とする。ある実施形態において、PPCは、それが、約100,000~約300,000g/molのMnを有することを特徴とする。ある実施形態において、PPCは、それが、約150,000~約250,000g/molのMnを有することを特徴とする。

【0080】

ある実施形態において、本発明のブレンドに存在するAPCは、高いパーセンテージのカーボネート結合、およびエーテル結合の低い含有量を含む。ある実施形態において、本発明のブレンドに存在するAPCは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが、85%、90%、91%、92%、93%、94%、95%、96%、97%、98%、99%、99.5%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ブレンドがPPCを含む場合、PPCは、それが、99%超のカーボネート結合を有することを特徴とする。ある実施形態において、PPCは、それが、低いエーテル結合含有量を有することを特徴とする。ある実施形態において、PPCは、それが、例えば、NMR分光法によって判定される際、本質的にエーテル結合を有しないことを特徴とする。

【0081】

理論によって制約されること、またはそれにより本発明の範囲を限定することなく、あ

る場合において、かなりの比率のエーテル結合を含有する先行技術のA P C組成物は、完全に交互ポリマーに対して、改善されたE B値を有し得ることが考えられる。それにもかかわらず、かかるエーテル結合は、組成物のガラス転移温度を低下させ得るか、そのガスバリア特性を低下させ得るか、または他の望ましくない結果を有し得るため、それらの存在を回避することが望ましい場合がある。したがって、ある実施形態において、本発明は、低いエーテル結合含有量を有するA P C組成物のE B値を増加させるための方法を提供する。

【0082】

ある実施形態において、ブレンドがP E Cを含む場合、P E Cは、それが、約85%超のカーボネート結合を有することを特徴とする。ある実施形態において、P E Cは、それが、約90%超、約95%超、または約98%超のカーボネート結合を有することを特徴とする。ある実施形態において、P E Cは、それが、低いエーテル結合含有量を有することを特徴とする。ある実施形態において、P E Cは、それが、例えば、N M R分光法によって判定される際、本質的にエーテル結合を有しないことを特徴とする。

10

【0083】

ある実施形態において、提供されるブレンドにおいて使用されるA P Cは、それらが、狭い分子量分布を有することを特徴とする。これは、脂肪族ポリカーボネートポリマーの多分散性指数(P D I)によって示すことができる。ある実施形態において、本発明の組成物におけるA P Cは、2未満のP D Iを有する。ある実施形態において、本発明の組成物におけるA P Cは、1.8未満のP D Iを有する。ある実施形態において、本発明の組成物におけるA P Cは、1.5未満のP D Iを有する。ある実施形態において、本発明の組成物におけるA P Cは、1.4未満のP D Iを有する。ある実施形態において、本発明の組成物におけるA P Cは、約1.0~1.2のP D Iを有する。ある実施形態において、本発明の組成物におけるA P Cは、約1.0~1.1のP D Iを有する。

20

【0084】

本発明のブレンドにおいて使用されるA P Cが一置換エポキシドに由来する(例えば、酸化プロピレン、1,2-ブチレンオキシド、エピクロルヒドリン、エポキシ化アルファオレフィン等といった)、ある実施形態において、脂肪族ポリカーボネートは、それが、位置規則的であることを特徴とする。位置規則性は、ポリマー鎖内で頭尾配設に配向される、隣接するモノマー単位のパーセンテージとして表すことができる。ある実施形態において、提供されるポリマー組成物における脂肪族ポリカーボネート鎖は、約80%よりも高い頭尾含有量を有する。ある実施形態において、頭尾含有量は、約85%よりも高い。ある実施形態において、頭尾含有量は、約90%よりも高い。ある実施形態において、頭尾含有量は、約91%超、約92%超、約93%超、約94%超、または約95%超である。ある実施形態において、ポリマーの頭尾含有量は、 ^1H または ^{13}C N M R分光法によって判定されるとおりである。

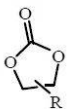
30

【0085】

ある実施形態において、本発明のブレンドにおいて使用されるA P Cは、それらが、低い環状カーボネートの含有量を有するか、または有しないことを特徴とする。環状カーボネートは、エポキシドC O₂共重合の間の副生成物として一般的に形成され、式：

40

【化1-4】



を有する。2から5つの繰り返し単位を含有する高級環状オリゴマーもまた、一般的にはより少ない程度であるが、形成され得る。理論によって制約されること、またはそれにより本発明の範囲を限定することなく、かかる環状副生成物の存在は、可塑剤として作用することができ、それによって、ある先行技術のA P C組成物において観察される脆弱性を低下させるということが考えられる。とりわけ、本発明は、これらの小分子が、ポリマー

50

組成物から移動して、望ましくない汚染、または環状不純物の含有量が減少するにつれて、経時的にAPC組成物の脆弱性の増加につながる可能性があるため、かかる不純物を実質的に含まないAPCブレンドを提供することを目的とする。したがって、ある実施形態において、本発明は、ごくわずかな環状カーボネート含有量を有するAPC組成物のEB値を増加させるための方法を提供する。

【0086】

ある実施形態において、提供されるブレンドに存在するAPCは、約5重量パーセント未満の環状カーボネート含有量を有する。ある実施形態において、環状カーボネート含有量は、約3重量パーセント未満、約2重量パーセント未満、または約1重量パーセント未満である。ある実施形態において、提供されるブレンドに存在するAPCは、それらが、例えば、APC組成物の¹H NMRスペクトルまたはIR吸収スペクトルの検査によって判定される際、本質的に環状カーボネートを含有しないことを特徴とする。

10

【0087】

ある実施形態において、提供されるブレンドに存在するAPCは、それらが、実質的に非晶質であることを特徴とする。ある実施形態において、APCは、それらの純粋なブレンドされていない状態において、それらが、例えば、デジタル走査熱量測定(DSC)を使用して測定される際、融点を呈しないことを特徴とする。

【0088】

a) ポリ(プロピレンカーボネート)

ポリ(プロピレンカーボネート)(PPC)は、それが、Inoueおよび同僚らによって最初に合成された1960年代後半以来、既知であるポリマーである。最近まで、高分子量PPCは、酸化プロピレンおよびCO₂を共重合するように、主にカルボン酸亜鉛触媒を使用して合成されてきた。得られる材料は、熱心な調査の焦点であり、いくつかの企業は、汎用熱可塑性物質としての材料に対する用途を検討している。これまで、PPCは、PPCの清浄な熱分解が有利である用途において、犠牲ポリマーとしてのみ商業化されてきた。熱可塑性物質用途のための材料の商業化は、乏しい熱および処理特性によって複雑にされてきた。最近、遷移金属錯体が、CO₂およびエポキシドの共重合に対して開発されているが、本開示の前には、かかる錯体は、改善されたPPC材料の調製において、十分に活用および/または最適化されてこなかった。

20

【0089】

一部の実施形態において、本発明は、ポリ(プロピレンカーボネート)(PPC)と、1つ以上のポリオレフィンポリマーとを含む、ポリマーブレンドを提供する。ある実施形態において、提供されるポリマーブレンドは、付録Aにおいて説明される1つ以上のPPC組成物を含む。

30

【0090】

ある実施形態において、本発明のポリマーブレンドは、約200を上回る熱安定性を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。例えば、図1は、200に保持された、PPCの2つの試料の経時的な質量を示す。見ることができるよう、亜鉛系触媒で産生される先行技術のPPC15は、構造的に精密なPPC10よりも高い速度で質量を損失する。この挙動は、典型的なポリオレフィン押出温度での先行技術のPPCの処理を不可能にする。以降の実施例から見られるように、かかる共押出は、構造的に精密なPPCを使用して予想外に成功する。

40

【0091】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、約1.7未満のPDIを有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドは、約1.1~約1.5のPDIを有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドは、約1.2~約1.4のPDIを有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドは、約1.2のPDIを有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドは、約1.1のPDIを有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

50

【 0 0 9 2 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、約 4 : 1 超の頭尾比率 (H : T) を有するポリ (プロピレンカーボネート) を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドは、約 5 : 1 超の頭尾比率 (H : T) を有するポリ (プロピレンカーボネート) を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドは、約 10 : 1 超の頭尾比率 (H : T) を有するポリ (プロピレンカーボネート) を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドは、約 100 : 1 超の頭尾比率 (H : T) を有するポリ (プロピレンカーボネート) を含む。

【 0 0 9 3 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、平均で、カーボネート結合のパーセンテージが 85 % 以上であることを特徴とするポリ (プロピレンカーボネート) を含む。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 90 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 91 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 92 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 93 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 94 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 95 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 96 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 97 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 98 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 99 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 99.5 % 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ (プロピレンカーボネート) 組成物は、エーテル結合が、 ^1H または ^{13}C NMR によって検出可能ではないことを特徴とする。

【 0 0 9 4 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、少なくとも 4 : 1 の頭尾比率、1.5 未満の PDI、10 % 未満のエーテル含有量、および 75,000 g/mol ~ 350,000 g/mol の M_N を有する、ポリ (プロピレンカーボネート) を含む。

【 0 0 9 5 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、少なくとも 9 : 1 の頭尾比率、1.5 未満の PDI、10 % 未満のエーテル含有量、および 75,000 g/mol ~ 350,000 g/mol の M_N を有する、ポリ (プロピレンカーボネート) を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドは、少なくとも 6 : 1 の頭尾比率、1.4 未満の PDI、10 % 未満のエーテル含有量、および 75,000 g/mol ~ 350,000 g/mol の M_N を有する、ポリ (プロピレンカーボネート) を含む。

【 0 0 9 6 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、少なくとも 4 : 1 の頭尾比率、1.4 未満の PDI、10 % 未満のエーテル含有量、および 75,000 g/mol ~ 350,000 g/mol の M_N を有する、ポリ (プロピレンカーボネート) を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドは、少なくとも 4 : 1 の頭尾比率、1.5 未満の PDI、5 % 未満のエーテル含有量、および 75,000 g/mol ~ 350,000 g/mol の

10

20

30

40

50

M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

【0097】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、少なくとも20:1の頭尾比率、1.3未満のPDI、2%未満のエーテル含有量、および75,000g/mol~350,000g/molの M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

【0098】

ある実施形態において、提供されるポリマーブレンドは、以下から成る群より選択されるポリ(プロピレンカーボネート)を含む：

i) 約50,000g/mol~約500,000g/molの数平均分子量、約1.5未満の多分散性指数、少なくとも95%のカーボネート結合、および5%未満の環状エーテル含有量を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)；

10

ii) 約75,000g/mol~約300,000g/molの数平均分子量、約1.5未満の多分散性指数、少なくとも95%のカーボネート結合、および5%未満の環状エーテル含有量を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)；

iii) 約100,000g/mol~約250,000g/molの数平均分子量、約1.5未満の多分散性指数、少なくとも95%のカーボネート結合、および5%未満の環状エーテル含有量を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)；

iv) 約150,000g/mol~約210,000g/molの数平均分子量、約1.5未満の多分散性指数、少なくとも95%のカーボネート結合、および5%未満の環状エーテル含有量を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)；

20

v) 約180,000g/molの数平均分子量、約1.5未満の多分散性指数、少なくとも95%のカーボネート結合、および5%未満の環状エーテル含有量を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)；

vi) 約150,000g/mol~約400,000g/molの数平均分子量、約1.2未満の多分散性指数、少なくとも99%のカーボネート結合、および2%未満の環状エーテル含有量を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)；

vii) 約150,000g/mol~約400,000g/molの数平均分子量、約1.2未満の多分散性指数、少なくとも99%のカーボネート結合、2%未満の環状エーテル含有量、および少なくとも85%の頭尾比率を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)；

30

viii) 約150,000g/mol~約400,000g/molの数平均分子量、約1.2未満の多分散性指数、少なくとも99%のカーボネート結合、2%未満の環状エーテル含有量、および35超のTgを有する、ポリ(プロピレンカーボネート)；

ix) 約150,000g/mol~約400,000g/molの数平均分子量、約1.2未満の多分散性指数、少なくとも99%のカーボネート結合、2%未満の環状エーテル含有量、および37超のTgを有する、ポリ(プロピレンカーボネート)；ならびに

x) 約150,000g/mol~約400,000g/molの数平均分子量、約1.2未満の多分散性指数、少なくとも99%のカーボネート結合、2%未満の環状エーテル含有量、および40超のTgを有する、ポリ(プロピレンカーボネート)。

40

【0099】

b) ポリ(エチレンカーボネート)

ある実施形態において、本発明のポリマーブレンドは、PECを含む。ある実施形態において、本発明のポリマーブレンドは、約85%超、または約90%超のカーボネート結合を有するPECを含む。ある実施形態において、ブレンドは、付録Bにおいて説明されるPEC組成物のうちの1つ以上を含む。

【0100】

c) 他の脂肪族ポリカーボネート

ある実施形態において、本発明の押出ポリマーブレンドは、ポリ(プロピレンカーボネート)-コ-ポリ(エチレンカーボネート)を含む。かかるポリマーは、エチレンオキシドおよび酸化プロピレンとともにCO₂に由来するターポリマーを包含する。ある実施形

50

態において、ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)は、ランダムコポリマーである。他の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)は、テーパー型コポリマーである。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)は、ブロックコポリマーである。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)組成物は、約0.5%から約99.5%の範囲のPOに対するEOの比率を含有する。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)組成物は、純粋なポリカーボネートに関して付録AおよびBにおいて説明されるものと同様の特性を有する。

【0101】

II) ブレンドの非APC構成要素

上で説明される脂肪族ポリカーボネートに加えて、本発明の組成物は、1つ以上の追加のポリマーを含む。ある実施形態において、追加のポリマーは、それらが結晶性または半結晶性であることを特徴とする。

【0102】

ある実施形態において、ブレンドにおいて使用される結晶性または半結晶性ポリマーは、それを約250℃を下回る温度で押出することができることを特徴とする。ある実施形態において、ブレンドにおいて使用される結晶性または半結晶性ポリマーは、それを約220℃、約200℃、または約180℃を下回る温度で押出することができることを特徴とする。

【0103】

ある実施形態において、本発明のブレンドの非APC構成要素は、ポリオレフィン、ポリエステル、ポリエーテル、ポリカーボネート、およびポリアミドから成る群より選択される、結晶性または半結晶性ポリマーである。

【0104】

ある実施形態において、本発明のブレンドにおける結晶性または半結晶性ポリマーは、ポリオレフィンを含む。これらの実施形態のうちの一部において、ポリオレフィンは、LDPE、LLDPE、HDPE、ポリプロピレン、ポリスチレン、または相互との、もしくは他の非APCポリマーとのこれらのうちのいずれかのブレンドである。ある実施形態において、ポリオレフィンは、ポリエチレン、ポリプロピレン、高級オレフィンとのエチレンおよび/もしくはプロピレンのコポリマー、ならびにこれらのうちのいずれか2つ以上の混合物から成る群より選択される。ある実施形態において、ブレンドは、ポリエチレンを含む。ある実施形態において、ブレンドは、ポリプロピレンを含む。ある実施形態において、ブレンドは、低密度ポリエチレン(LDPE)を含む。ある実施形態において、ポリオレフィンは、線状低密度ポリエチレン(LLDPE)、高密度ポリエチレン(HDPE)、ポリプロピレンホモポリマー、エチレン - プロピレン、エチレン - プロピレン - ブテン、およびこれらの異形といったコポリマーを含む。官能化エチレンポリマー(例えば、無水物グラフトポリエチレン)、ならびにエチレンコポリマー(例えば、エチレンアクリレートコポリマー)もまた、使用することができる。

【0105】

理論によって制約されること、またはそれにより本発明の範囲を限定することなく、一部の実施形態において、LDPEは、それが、フィルムの溶融強度および延伸能力を改善する分岐を有するため、良好に性能することが考えられる。ある実施形態において、これは、その構造における長鎖分岐の存在に関するその高い伸長粘度による場合がある。この知識を使用して、本発明のある実施形態は、これらの特性を有するポリオレフィンを優先的に組み込む。

【0106】

一部の実施形態において、本発明のブレンドにおける非APCポリマーは、ポリ(乳酸)、熱可塑性デンプン、ポリ(3-ヒドロキシブチレート)、ポリ(3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(3-ヒドロキシブチレート - コ - 3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(

10

20

30

40

50

エチレンテレフタレート) (PET)、生分解性ポリエステル、例えば、ポリ(ブチレンアジペート)、ポリ(ブチレンサクシネート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-テレフタレート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-ブチレンサクシネート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-テレフタレート)、他の脂肪族および芳香族ポリエステル、ポリ(ビニルアルコール)、ポリ(酢酸ビニル)、エチレンビニルアルコールポリマー(EVOH)、ポリ(カプロラクトン)、ポリ(エチレングリコール)、ポリメタクリレート、ポリエステルアミド、ならびに相互との、もしくは別の非APCポリマーとの上記のいずれかの組み合わせから成る群より選択される。

【0107】

ある実施形態において、本発明のブレンドにおける結晶性または半結晶性ポリマーは、ポリエステルを含む。ある実施形態において、ポリエステルは、ポリ乳酸(PLA)、ポリ(3-ヒドロキシブチレート)PHB、ポリ(3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-テレフタレート)、ポリ(3-ヒドロキシブチレート-コ-3-ヒドロキシバレレート)、ポリブチレンサクシネート(PBS)、ポリ(3-ヒドロキシプロピオネート)、ポリプロピオラクトン、およびこれらのうちのいずれかの混合物またはコポリマーから成る群より選択される。

【0108】

本明細書において説明されるポリカーボネートに関しては、一般的に、ブレンドは、エラストマー、熱可塑性物質、または熱硬化性物質を含むが、これらに限定されない他のポリマーとともに調製することができる。エラストマーは、一般的に、 T_g (ガラス転移温度)および T_m (融点)が、存在する場合、周囲温度を下回り、通常、約20であると思なされる、ポリマーである。熱可塑性物質は、 T_g および/もしくは T_m が周囲温度であるか、またはそれを上回る、それらのポリマーである。ブレンドは、1軸または2軸押出機といった好適な装置における、溶液ブレンドまたは熔融ブレンドといった、当業者に既知である一般的な技術のうちのいずれかによって作製することができる。

【0109】

ポリカーボネートポリマーブレンドは、ほとんどいかなる種類のエラストマー、例えば、エチレン-プロピレン(EP)、エチレン-プロピレン-ジエン(EPPDM)、スチレン-ブタジエン(SBR)、天然ゴム、ポリイソブレン、ポリブタジエン、ネオブレン、ブチルゴム、スチレン-ブタジエンブロックコポリマー、セグメント化ポリエステル-ポリエーテルコポリマー、エラストマーポリウレタン、塩素化もしくはクロロスルホン酸化ポリエチレン、(過)フッ素化エラストマー、例えば、フッ化ビニリデン、ヘキサフルオロプロピレン、テトラフルオロエチレンのコポリマー、テトラフルオロエチレンおよびペルフルオロ(メチルビニルエーテル)のコポリマー、ならびにテトラフルオロエチレンおよびプロピレンのコポリマーで作製することができる。

【0110】

本明細書において説明されるポリカーボネートとブレンドするのに有用な好適な熱可塑性物質としては、ポリエステル、例えば、ポリ(乳酸)(PLA)、ポリ(3-ヒドロキシブチレート)(P3HB)、ポリ(4-ヒドロキシブチレート)(P4HB)、ポリ(ヒドロキシバレレート)(PHV)、ポリ(3-ヒドロキシプロピオネート)(P3HP)、ポリヒドロキシオクタノエート(PHO)、ポリ(エチレンテレフタレート)、ポリ(ブチレンテレフタレート)、およびポリ(エチレンアジペート)、他のポリカーボネート、例えば、芳香族ポリカーボネート、ならびに他の脂肪族ポリカーボネート、例えば、ポリ(エチレンカーボネート)、ポリ(ブチレンカーボネート)、ポリ(シクロヘキサノカーボネート)、ポリ(リモネンカーボネート)、ならびにCO₂およびいずれか2つ以上のエポキシドのターポリマー; ポリアミド、例えば、ナイロン-6、ナイロン-6,6、ナイロン-12、ナイロン-12,12、ナイロン-11、ならびにヘキサメチレンジアミン、アジピン酸、およびテレフタル酸のコポリマー; フッ素化ポリマー、例えば、エチレンおよびフッ化ビニリデンのコポリマー、テトラフルオロエチレンおよびヘキサフルオロプロピレンのコポリマー、テトラフルオロエチレンおよびペルフルオロ(アルキルビ

10

20

30

40

50

ニルエーテル)、例えば、ペルフルオロ(プロピルビニルエーテル)のコポリマー、ならびにポリ(フッ化ビニル);他のハロゲン化ポリマー、例えば、ポリ(塩化ビニル)およびポリ(塩化ビニリデン)、ならびにそのコポリマー;ポリオレフィン、例えば、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリビニルアルコール、およびポリスチレン、ならびにこれらのコポリマー;(メタ)アクリルポリマー、例えば、ポリ(メチルメタクリレート)およびこれらのコポリマー;オレフィン、例えば、エチレンと、種々の(メタ)アクリルモノマー、例えば、アルキルアクリレート、(メタ)アクリル酸、およびこれらのイオノマー、ならびにグリシジル(メタ)アクリレート)とのコポリマー;芳香族ポリエステル、例えば、ビスフェノールAならびにテレフタル酸およびノもしくはイソフタル酸のコポリマー;ならびに液晶ポリマー、例えば、芳香族ポリエステルまたは芳香族ポリ(エステル-アミド)が挙げられる。他の好適なブレンドポリマーとしては、ポリエーテル、例えば、ポリエチレングリコール、ポリプロピレングリコール、ポリエーテルエーテルケトン、ポリ(テトラメチレンエーテル)グリコール、ポリフェニルエーテル、およびポリオキシメチレンが挙げられる。

10

20

30

40

50

【0111】

本明細書において開示される押出ポリマーブレンドの全ては、任意に、通常、エラストマーおよび熱可塑性物質に添加される種々の添加剤と混合することができる[例えば、Encyclopedia of Polymer Science and Engineering, 2nd Ed. vol. 14, p. 327-410を参照されたい]。例えば、補強、非補強、および導電性充填剤、例えば、カーボンブラック、ガラス繊維、有機材料、例えば、デンプンおよび木粉、鉱物、例えば、粘土、雲母、およびタルク、ガラス球、硫酸バリウム、亜鉛オキシド、炭素繊維およびアラミド繊維、またはフィブリドが、使用されてもよい。抗酸化剤、オゾン劣化防止剤、顔料、染料、艶消し剤、熔融強度を改善し、処理中の分子量を増大するための鎖延長剤、および架橋を促進する化合物が、添加されてもよい。種々の炭化水素油またはエポキシ化植物油といった可塑剤もまた、使用されてもよい。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ナノ粒子またはナノ材料を含有してもよい。ナノ材料、例えば、炭素ナノチューブ、フラーレン、グラフェン、バッキーボール、量子ドット、コロイド金属、例えば、銀および金および白金、鉄または他の金属ナノ粒子もしくは他の非炭素ナノ粒子もまた、ポリカーボネートに組み込まれてもよい。

【0112】

a) ポリオレフィン

上で述べられるように、一部の実施形態において、本発明の押出ポリマーブレンドは、1つ以上のポリオレフィンを含む。ある実施形態において、ポリオレフィンは、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリスチレン、ポリ(アルファオレフィン)、ポリ塩化ビニル、およびこれらのうちのいずれか2つ以上の混合物またはコポリマーから成る群より選択される。一部の実施形態において、ポリオレフィンは、LDPE、LLDPE、HDPE、ポリプロピレン、または上記のいずれかの組み合わせである。

【0113】

ある実施形態において、本発明は、ポリエチレンを含む押出ポリマーブレンドを包含する。超高分子量ポリエチレン(UHMWPE);超低分子量ポリエチレン(ULMWPEもしくはPE-WAX);高分子量ポリエチレン(HMWPE);高密度ポリエチレン(HDPE);高密度架橋ポリエチレン(HDXLPE);架橋ポリエチレン(PEXもしくはXLPE);中密度ポリエチレン(MDPE);線状低密度ポリエチレン(LLDPE);低密度ポリエチレン(LDPE);超低密度ポリエチレン(VLDPE);およびこれらのうちの2つ以上の混合物または組み合わせを含むが、これらに限定されない、多くの等級および質のポリエチレンが存在し得る。

【0114】

ある実施形態において、本発明は、エチレンおよび1つ以上のモノマーの共重合に由来するポリオレフィンを含む、押出ポリマーブレンドを包含する。ある実施形態において

、かかるコポリマーは、エチレン-プロピレンコポリマーを含む。ある実施形態において、かかるコポリマーは、エチレン-アルファオレフィンコポリマーを含む。ある実施形態において、かかるコポリマーは、エチレン酢酸ビニルコポリマーを含む。ある実施形態において、かかるコポリマーは、エチレンアクリレートコポリマーを含む。

【0115】

ある実施形態において、本発明は、ポリプロピレンを含む押出ポリマーブレンドを包含する。多くの等級および質のポリプロピレンが、業界において利用可能であり、かつ当業者に既知であり、これらは、そのまま、または本発明の押出ブレンドへの組み込みのために、2つ以上の等級のブレンドとして使用されてもよい。

【0116】

ある実施形態において、押出ポリマーブレンドは、ポリオレフィンよりも少ない脂肪族ポリカーボネート（APC）を含有する。ある実施形態において、APCは、押出ポリマーブレンドの約1質量パーセントから約50質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、APCは、押出ポリマーブレンドの約1質量パーセントから約10質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、APCは、押出ポリマーブレンドの約5質量パーセントから約20質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、APCは、押出ポリマーブレンドの約10質量パーセントから約30質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、APCは、押出ポリマーブレンドの約25質量パーセントから約40質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、APCは、押出ポリマーブレンドの約30質量パーセントから約50質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、押出ブレンドに存在するAPCは、単一のポリマーを含む一方、他の実施形態において、押出ブレンドに存在するAPCは、2つ以上の異なるポリマーの混合物を含む。2つ以上の異なるAPCがブレンドに存在する時、それらは、それらの繰り返し単位の同一性、または分子量、形状（例えば、直鎖もしくは分岐鎖）といった他の特性等において、異なってもよい。

【0117】

ある実施形態において、押出ポリマーブレンドは、ポリオレフィンよりも多いAPCを含有する。ある実施形態において、ポリオレフィンは、押出ポリマーブレンドの約1質量パーセントから約50質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、ポリオレフィンは、押出ポリマーブレンドの約1質量パーセントから約10質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、ポリオレフィンは、押出ポリマーブレンドの約5質量パーセントから約20質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、ポリオレフィンは、押出ポリマーブレンドの約10質量パーセントから約30質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、ポリオレフィンは、押出ポリマーブレンドの約25質量パーセントから約40質量パーセントの範囲内で存在する。ある実施形態において、ポリオレフィンは、約押出ポリマーブレンドの30質量パーセントから約50質量パーセントの範囲内で存在する。上で説明されるブレンドのいずれかにおいて、存在するポリオレフィン、単一のポリオレフィン組成物、または2つ以上の異なるポリオレフィン組成物の混合物であってもよい。

【0118】

III. フィルム組成物

本発明は、とりわけ、脂肪族ポリカーボネートおよびポリオレフィンの押出ブレンドから形成されるバリアフィルムを提供する。ある実施形態において、バリアフィルムは、脂肪族ポリカーボネートおよびポリオレフィンの押出ブレンドから形成される酸素バリアフィルムである。一部の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートは、低酸素透過性を有するバリアポリマーとして作用し、ポリオレフィンは、構造的ポリマーとして作用する。ある実施形態において、バリアフィルムは、構造的ポリマーよりも低い酸素透過性、およびバリアポリマーよりも良好な構造的特性を有することを特徴とする。一部の実施形態において、バリアポリマーは、ポリ（プロピレンカーボネート）（PPC）である。一部の実施形態において、バリアポリマーは、ポリ（エチレンカーボネート）（PEC）である

10

20

30

40

50

。一部の実施形態において、構造的ポリマーは、低密度ポリエチレン（LDPE）である。一部の実施形態において、構造的ポリマーは、線状低密度ポリエチレン（LLDPE）である。一部の実施形態において、構造的ポリマーは、高密度ポリエチレン（HDPE）である。一部の実施形態において、構造的ポリマーは、ポリプロピレン（PP）である。一部の実施形態において、ポリマーブレンドは、食品包装における使用のためのフィルムである。酸素バリアが、脂肪族ポリカーボネート（例えば、PECのような）と組み合わせることによって、ポリオレフィン単独よりも有意に改善される実施形態において、水分への低い感受性を有する単一の単分子層の高酸素バリアフィルムを開発することができる。

【0119】

一部の実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネートおよび少なくとも1つの他のポリマーを含む、ポリマーフィルムを提供する。一部の実施形態において、フィルムは、少なくとも70重量パーセントの脂肪族ポリカーボネート、および最大約30%の結晶性または半結晶性ポリマーを含む。一部の実施形態において、提供されるフィルムは、バリアフィルムである。一部の実施形態において、提供されるフィルムは、それが、低い酸素透過性を有することを特徴とする。

【0120】

ある実施形態において、本発明は、上で説明される、または本明細書におけるクラスおよびサブクラスにおけるフィルムを含む、パッケージまたは包装材料を含む。ある実施形態において、かかる包装材料は、単層フィルムを含む。ある実施形態において、かかる包装材料は、多層フィルムを含む。ある実施形態において、フィルムは、食品包装材料を含む。ある実施形態において、包装材料は、好適な厚さのフィルムの熱形成を介して作製される。

【0121】

組成物の以下のサブカテゴリは、本発明のある実施形態、および一部の態様の特性を説明するために言及される。以下のサブカテゴリは、相互に対して排他的ではない（即ち、1つのカテゴリにおける特定の組成物の説明は、組成物が、別のカテゴリにおいて説明される特性を有しないことを示唆することを意味しない）ということが理解されよう。

【0122】

a) ポリ（プロピレンカーボネート）ブレンド

ある実施形態において、本発明は、ポリプロピレンカーボネートを含むポリマーブレンドバリアフィルムを包含する。ある実施形態において、提供されるバリアフィルムは、付録Aにおいて説明される1つ以上のPPC組成物を含む。

【0123】

ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、約1.7未満のPDIを有するポリ（プロピレンカーボネート）を含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、約1.1～約1.5のPDIを有するポリ（プロピレンカーボネート）を含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、約1.2～約1.4のPDIを有するポリ（プロピレンカーボネート）を含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、約1.2未満のPDIを有するポリ（プロピレンカーボネート）を含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、約1.1のPDIを有するポリ（プロピレンカーボネート）を含む。

【0124】

ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、約4:1超の頭尾比率（H:T）を有するポリ（プロピレンカーボネート）を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、約5:1超の頭尾比率（H:T）を有するポリ（プロピレンカーボネート）を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、約10:1超の頭尾比率（H:T）を有するポリ（プロピレンカーボネート）を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、約100:1超の頭尾比率（H:T）を有するポリ（プロピレンカーボネート）を含む。

10

20

30

40

50

【 0 1 2 5 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、平均で、カーボネート結合のパーセンテージが 85% 以上であることを特徴とする、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 90% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 91% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 92% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 93% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 94% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 95% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 96% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 97% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 98% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 99% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが 99.5% 以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)ブレンドは、エーテル結合が、 ^1H または ^{13}C NMR によって検出可能ではないことを特徴とする。

10

20

【 0 1 2 6 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、少なくとも 4 : 1 の頭尾比率、1.5 未満の PDI、10% 未満のエーテル含有量、および 75,000 g/mol ~ 500,000 g/mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

30

【 0 1 2 7 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、少なくとも 9 : 1 の頭尾比率、1.5 未満の PDI、10% 未満のエーテル含有量、および 75,000 g/mol ~ 350,000 g/mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

【 0 1 2 8 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、少なくとも 6 : 1 の頭尾比率、1.4 未満の PDI、10% 未満のエーテル含有量、および 75,000 g/mol ~ 350,000 g/mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

40

【 0 1 2 9 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、少なくとも 4 : 1 の頭尾比率、1.4 未満の PDI、10% 未満のエーテル含有量、および 75,000 g/mol ~ 350,000 g/mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

【 0 1 3 0 】

ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、少なくとも 4 : 1 の頭尾比率、1.5 未満の PDI、5% 未満のエーテル含有量、および 75,000 g/mol ~ 350,000 g/mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

50

【0131】

ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、少なくとも20：1の頭尾比率、1.3未満のPDI、2%未満のエーテル含有量、および75,000g/mol～350,000g/molの M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

【0132】

b) ポリ(エチレンカーボネート)ブレンド

ある実施形態において、本発明のポリマーブレンドバリアフィルムは、PECを含む。ある実施形態において、本発明のポリマーブレンドバリアフィルムは、約90%超のカーボネート結合を有するPECを含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドバリアフィルムは、付録Bにおいて説明されるPEC組成物のうちの1つ以上を含む。

10

【0133】

c) 脂肪族ポリカーボネートとその他のブレンド

ある実施形態において、本発明のポリマーブレンドバリアフィルムは、ポリ(プロピレンカーボネート)-コ-ポリ(エチレンカーボネート)を含む。かかるポリマーは、エチレンオキシドおよび酸化プロピレンとの CO_2 に由来するターポリマーを包含する。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)-コ-ポリ(エチレンカーボネート)は、ランダムコポリマーである。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)-コ-ポリ(エチレンカーボネート)は、テーパー型コポリマーである。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)-コ-ポリ(エチレンカーボネート)は、ブロックコポリマーである。ポリ(プロピレンカーボネート)-コ-ポリ(エチレンカーボネート)組成物は、約0.5%から約99.5%の範囲のPOに対するEOの比率を含有してもよい。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)-コ-ポリ(エチレンカーボネート)組成物は、純粋なポリカーボネートに関して付録AおよびBにおいて説明されるものと同様の特性を有する。

20

【0134】

一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ポリマーブレンドバリアフィルムの総重量の少なくとも約5重量%に寄与する。これらの実施形態のうちの一部において、ポリオレフィン、ポリマーブレンドバリアフィルムの総重量の少なくとも約5重量%を成す。これらの実施形態のうちの一部において、ポリマーブレンドフィルムは、単一のポリマーブレンドから押出される。これらの実施形態のうちの一部において、ポリマーブレンドフィルムは、約100ミル以下の厚さを有する。

30

【0135】

一部の実施形態において、ポリマーブレンドフィルムは、2つ以上のポリカーボネートを含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドフィルムは、ポリ(エチレンカーボネート)、およびポリ(プロピレンカーボネート)を含む。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、異なる分子量を有する。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、異なる化学構造を有する。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、異なる分子量および異なる化学構造を有する。

40

【0136】

一部の実施形態において、ポリマーブレンドフィルムは、2つ以上の非ポリカーボネートポリマーを含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドフィルムは、2つ以上のポリカーボネート、および2つ以上の非ポリカーボネートポリマーを含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドフィルムは、2つ以上のポリカーボネート、および2つ以上のポリオレフィンを含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドフィルムは、2つ以上のポリカーボネート、および2つ以上のポリエステルを含む。

【0137】

d) 低酸素透過性を有するポリマーブレンドフィルム

一部の実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネートおよび少なくとも1つの他のポリマーを含む、バリアフィルムを包含する。一部の実施形態において、ポリオレフ

50

インは、かかるブレンドの必要とされる構成要素ではない。

【0138】

ある実施形態において、本発明は、第1の酸素透過性を有する少なくとも1つのポリカーボネート、および第1の酸素透過性よりも高い第2の酸素透過性を有する第2のポリマーを含む、バリアフィルムを包含する。ポリマーブレンドフィルムは、第1の酸素透過性の値および第2の酸素透過性の値を使用して、体積加算モデルから計算される酸素透過性値未満の第3の酸素透過性を有する。一部の実施形態において、第3の酸素透過性は、第1の酸素透過性の値を使用して、および第2の酸素透過性の値を使用して、Maxwellモデルから計算される酸素透過性値未満である。

【0139】

ある実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネートおよび少なくとも1つの他のポリマーを含む、ポリマーブレンドフィルムを提供し、フィルムの酸素透過性は、脂肪族ポリカーボネートの酸素透過性、および他方のポリマー（複数を含む）の酸素透過性の値を使用して、体積加算モデルから計算される酸素透過性値の3分の2未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、体積加算モデルから予想される値の2分の1未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、体積加算モデルから予想される値の3分の1未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、体積加算モデルから予想される値の4分の1未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、体積加算モデルから予想される値の5分の1未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、体積加算モデルから予想される値の8分の1未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、体積加算モデルから予想される値の10分の1未満である。

【0140】

ある実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネートおよび少なくとも1つの他のポリマーを含む、ポリマーブレンドフィルムを提供し、フィルムの酸素透過性は、脂肪族ポリカーボネートの酸素透過性、および他方のポリマー（複数を含む）の酸素透過性の値を使用して、Maxwellモデルから計算される酸素透過性値の3分の2未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、Maxwellモデルから予想される値の2分の1未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、Maxwellモデルから予想される値の3分の1未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、Maxwellモデルから予想される値の4分の1未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、Maxwellモデルから予想される値の5分の1未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、Maxwellモデルから予想される値の8分の1未満である。ある実施形態において、フィルムの酸素透過性は、Maxwellモデルから予想される値の10分の1未満である。

【0141】

一部の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートおよび他方のポリマー（複数を含む）は、ポリマーブレンドを直接形成するように、押出によって組み合わせられる。一部の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートおよび他方のポリマー（複数を含む）は、ポリマーブレンドを形成するように押出によって組み合わせられ、これは、次いで、ポリマーブレンドフィルムを形成するように、第2のステップにおいて処理される。

【0142】

これらの実施形態のうちの一部において、他方のポリマーは、LDPE、LLDPE、HDPE、ポリプロピレン、ポリスチレン、ポリ塩化ビニル、ポリ（乳酸）、熱可塑性デンプン、ポリ（3-ヒドロキシブチレート）、ポリ（3-ヒドロキシバレレート）、ポリ（3-ヒドロキシブチレート-コ-3-ヒドロキシバレレート）、ポリ（エチレンテレフタレート）（PET）、生分解性ポリエステル、例えば、ポリ（ブチレンアジペート）、ポリ（ブチレンサクシネート）、ポリ（ブチレンアジペート-コ-テレフタレート）、ポリ（ブチレンアジペート-コ-ブチレンサクシネート）、他の脂肪族および芳香族ポリエステル、ポリ（ビニルアルコール）、ポリ（酢酸ビニル）、エチレンビニルアルコールポ

10

20

30

40

50

リマー（EVOH）、ポリ（カプロラクトン）、ポリ（エチレングリコール）ジメタクリレート、ポリエステルアミド、または上記のいずれかの組み合わせである。

【0143】

ある実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネートおよびポリエステルを含む、バリアフィルムを包含する。ある実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネートおよびバイオポリエステルを含む、バリアフィルムを包含する。ある実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネートおよびポリ乳酸を含む、バリアフィルムを包含する。ある実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネートおよびポリヒドロキシブチレートを含む、バリアフィルムを包含する。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ポリ（エチレンカーボネート）、ポリ（プロピレンカーボネート）、ポリ（エチレン-プロピレンカーボネート）ターポリマー、またはこれらの任意の組み合わせである。

10

【0144】

局部応力または剪断速度、界面張力、組成、押出機の流動場、ならびに2つの混合ポリマー溶解物の相対粘度および溶融弾性レベルに依存して、約180,000の分子量を有するPPCでの上の場合において観察されるが、体積加算モデルを使用して計算される酸素透過性レベルを下回る、ポリマーブレンドフィルムの酸素透過性レベルは、脂肪族ポリカーボネート、および脂肪族ポリカーボネートに対して様々な分子量にわたる他のポリマーで達成することができるということが予想される。一部の実施形態において、Maxwellモデルを使用して計算される酸素透過性レベルを下回るポリマーブレンドフィルムの酸素透過性レベルは、脂肪族ポリカーボネートに対して様々な分子量にわたって達成することができるということが予想される。一部の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートは、少なくとも約40,000の分子量を有する。一部の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートは、約300,000以下の分子量を有する。一部の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートは、約40,000から約300,000の範囲内の分子量を有する。

20

【0145】

局部応力または剪断速度、界面張力、組成、押出機の流動場、ならびに2つの混合ポリマー溶解物の相対粘度および溶融弾性レベルに依存して、PPCおよびポリオレフィンの50/50重量%ポリマーブレンドでの上の場合において観察されるが、体積加算モデルを使用して計算される酸素透過性レベルを下回る、ポリマーブレンドフィルムの酸素透過性レベルは、様々なブレンド組成物にわたって、ポリカーボネートおよびポリオレフィンで達成することができるということが予想される。一部の実施形態において、Maxwellモデルを使用して計算される酸素透過性レベルを下回る、ポリマーブレンドフィルムの酸素透過性レベルを達成することができるということが予想される。

30

【0146】

一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ポリマーブレンドバリアフィルムの総重量の少なくとも約5重量%を構成する。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ポリマーブレンドバリアフィルムの総重量の少なくとも約10重量%を構成する。一部の実施形態において、ポリカーボネートの量は、ブレンド全体の約10重量%から約90重量%の範囲内である。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ブレンド全体の約20重量%から約80重量%の範囲内である。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ブレンド全体の約20重量%から約50重量%の範囲内である。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ブレンド全体の約40重量%から約60重量%の範囲内である。一部の実施形態において、他方のポリマー（1つまたは複数）は、ポリマーブレンドバリアフィルムの総重量の少なくとも約10重量%を構成する。一部の実施形態において、他方のポリマー（複数を含む）は、ブレンド全体の約20重量%から約50重量%の範囲内である。

40

【0147】

e) 結晶性または半結晶性ポリマーを含むポリマーブレンドフィルム

ある実施形態において、本発明は、少なくとも70重量パーセントの脂肪族ポリカーボ

50

ネット、および最大約30%の結晶性または半結晶性ポリマーを含む、ポリマーフィルムを包含し、フィルムが、少なくとも100%のASTM方法D882で測定される破断前伸長値を有することを特徴とする。ある実施形態において、かかるフィルムは、上で、および本明細書の付録において説明される、APC組成物のうちのいずれか1つ以上を含む。ある実施形態において、かかるフィルムは、ブレンドにおけるAPCが、エーテル結合を実質的に含まないことをさらに特徴とする。ある実施形態において、かかるフィルムは、それらが環状カーボネートを実質的に含まないことをさらに特徴とする。

【0148】

ある実施形態において、本発明は、少なくとも70重量パーセントの、ポリ(プロピレンカーボネート)およびポリ(エチレンカーボネート)のうちの1つ以上を含む、ポリマーフィルムを包含する。ある実施形態において、本発明は、少なくとも70重量パーセントのポリ(プロピレンカーボネート)を含む、ポリマーフィルムを包含する。ある実施形態において、本発明は、少なくとも75、少なくとも80、少なくとも90、または少なくとも95重量パーセントのポリ(プロピレンカーボネート)を含む、ポリマーフィルムを包含する。ある実施形態において、かかるフィルムは、ブレンドにおけるポリ(プロピレンカーボネート)が、エーテル結合を実質的に含まないことをさらに特徴とする。ある実施形態において、かかるフィルムは、それらがプロピレンカーボネートを実質的に含まないことをさらに特徴とする。

10

【0149】

ある実施形態において、本発明は、少なくとも70重量パーセントのポリ(エチレンカーボネート)を含む、ポリマーフィルムを包含する。ある実施形態において、本発明は、少なくとも75、少なくとも80、少なくとも90、または少なくとも95重量パーセントのポリ(エチレンカーボネート)を含む、ポリマーフィルムを包含する。

20

【0150】

ある実施形態において、本発明は、少なくとも70重量パーセントの組み合わせた1つ以上のAPC、および約0.5から約30重量パーセントの1つ以上のポリオレフィンポリマーを含む、ポリマーフィルムを包含する。ある実施形態において、かかるフィルムは、約1から約25重量パーセントの1つ以上のポリオレフィンポリマーを含む。ある実施形態において、かかるフィルムは、約1から約10重量パーセントの1つ以上のポリオレフィンポリマーを含む。ある実施形態において、かかるフィルムは、約2から約5重量パーセントの1つ以上のポリオレフィンポリマーを含む。ある実施形態において、かかるフィルムは、約5重量パーセントの1つ以上のポリオレフィンポリマーを含む。ある実施形態において、ポリオレフィンポリマーは、ポリエチレン、ポリプロピレン、およびポリエチレン-コ-プロピレンのうちの1つ以上を含む。ある実施形態において、プラスチックフィルムは、約5重量パーセントのポリエチレンを含む。ある実施形態において、プラスチックフィルムは、約5重量のLDPEを含む。ある実施形態において、かかるフィルムは、典型的にポリマーフィルムに含まれ、当該技術分野において既知である、相溶化剤または他の添加剤をさらに含む。

30

【0151】

ある実施形態において、本発明のプラスチックフィルムは、配向されたフィルムである。ある実施形態において、本発明のプラスチックフィルムは、延伸ステップに供されている。ある実施形態において、本発明のプラスチックフィルムは、二軸延伸されている。ある実施形態において、本発明のプラスチックフィルムは、ブローフィルムプロセスによって作製されている。

40

【0152】

ある実施形態において、延伸前のフィルムのASTM D882で測定される破断前伸長値は、50%未満である。ある実施形態において、本発明は、少なくとも70重量パーセントの脂肪族ポリカーボネートを含む、プラスチックフィルムを包含し、フィルムが延伸されており、延伸前にASTM D882を使用して測定される破断前伸長値が50%未満であり、延伸後にASTM D882を使用して測定される破断前伸長値が100%

50

超であることを特徴とする。

【0153】

f) 共連続的層状形態を有するポリマーブレンド

一部の実施形態において、本発明は、特定の形態を有するポリマーブレンドを提供する。一部の実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネートおよび少なくとも1つの他のポリマーを含む、ポリマーブレンドを包含し、ブレンドが、共連続的層状形態を呈することを特徴とする。ある実施形態において、かかる形態は、ポリマーブレンドから調製される試料の顕微鏡写真を評価することによって、解明することができる。PPCおよびポリエチレンを含み、共連続的層状形態を呈する、ポリマーブレンドの走査電子顕微鏡写真(SEM)の例を、図2に示す。図3は、共連続的層状形態を有しない同様のブレンドのSEMを示す。

10

【0154】

ある実施形態において、本発明は、少なくとも1つの脂肪族ポリカーボネート、および少なくとも1つの非脂肪族ポリカーボネートポリマーを含む、ポリマーフィルムを包含し、フィルムは、共連続的層状形態を呈することを特徴とする。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーフィルムは、少なくとも1つの脂肪族ポリカーボネート、および少なくとも1つのポリオレフィンを含む。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーフィルムは、少なくとも1つの脂肪族ポリカーボネート、およびポリエチレンを含む。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーフィルムは、少なくとも1つの脂肪族ポリカーボネート、および少なくとも1つのポリプロピレンを含む。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーフィルムは、少なくとも1つの脂肪族ポリカーボネート、および少なくとも1つのポリエステルを含む。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーフィルムは、少なくとも1つの脂肪族ポリカーボネート、およびPLAを含む。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーフィルムは、少なくとも1つの脂肪族ポリカーボネート、およびPHBを含む。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーフィルムは、少なくとも1つの相溶化剤をさらに含む。

20

【0155】

一部の実施形態において、ポリカーボネートおよび他方のポリマーは、直接、ポリマーブレンドフィルムを形成するように、押出によって組み合わされる。一部の実施形態において、ポリカーボネートおよび他方のポリマーは、ポリマーブレンドを形成するように、押出によって組み合わされ、これは、次いで、ポリマーブレンドフィルムを形成するように、押出される。

30

【0156】

一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するブレンドにおける他方のポリマーは、LDPE、LLDPE、HDPE、ポリプロピレン、ポリスチレン、ポリ(乳酸)、熱可塑性デンプン、ポリ(3-ヒドロキシブチレート)、ポリ(3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(3-ヒドロキシブチレート-コ-3-ヒドロキシバレレート)、ポリ(エチレンテレフタレート)(PET)、生分解性ポリエステル、例えば、ポリ(ブチレンアジペート)、ポリ(ブチレンサクシネート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-ブチレンサクシネート)、ポリ(ブチレンアジペート-コ-テレフタレート)、他の脂肪族および芳香族ポリエステル、ポリ(ビニルアルコール)、ポリ(酢酸ビニル)、エチレンビニルアルコールポリマー(EVOH)、ポリ(カプロラクトン)、ポリ(エチレングリコール)ジメタクリレート、ポリエステルアミド、または上記のいずれかの組み合わせから成る群より選択される。

40

【0157】

i) ポリ(プロピレンカーボネート)

ある実施形態において、本発明は、ポリプロピレンカーボネートを含む、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドを包含する。ある実施形態において、共連続的層状形態を有する提供されるブレンドは、付録Aにおいて説明される1つ以上のPPC組成物を含む

50

。

【0158】

ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約1.7未満のPDIを有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約1.1~約1.5のPDIを有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約1.2~約1.4のPDIを有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約1.2未満のPDIを有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約1.1のPDIを有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

10

【0159】

ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約4:1超の頭尾比率(H:T)を有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約5:1超の頭尾比率(H:T)を有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約10:1超の頭尾比率(H:T)を有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約100:1超の頭尾比率(H:T)を有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

20

【0160】

ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、平均で、カーボネート結合のパーセンテージが85%以上であることを特徴とする、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが90%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが91%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが92%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが93%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが94%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが95%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが96%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが97%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが98%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが99%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、平均で、組成物において、カーボネート結合のパーセンテージが99.5%以上であることを特徴とする。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)組成物は、エーテル結合が、 ^1H または ^{13}C NMRによって検出可能ではないことを特徴とする。

30

40

【0161】

ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、少なくとも4:1の頭尾比率、1.5未満のPDI、10%未満のエーテル含有量、および75,00

50

0 g / mol ~ 350, 000 g / mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

【0162】

ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、少なくとも9 : 1の頭尾比率、1.5未満のPDI、10%未満のエーテル含有量、および75, 000 g / mol ~ 350, 000 g / mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、少なくとも6 : 1の頭尾比率、1.4未満のPDI、10%未満のエーテル含有量、および75, 000 g / mol ~ 350, 000 g / mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

10

【0163】

ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、少なくとも4 : 1の頭尾比率、1.4未満のPDI、10%未満のエーテル含有量、および75, 000 g / mol ~ 350, 000 g / mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、少なくとも4 : 1の頭尾比率、1.5未満のPDI、5%未満のエーテル含有量、および75, 000 g / mol ~ 350, 000 g / mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

【0164】

ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、少なくとも20 : 1の頭尾比率、1.3未満のPDI、2%未満のエーテル含有量、および75, 000 g / mol ~ 350, 000 g / mol の M_N を有する、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

20

【0165】

ii) ポリ(エチレンカーボネート)

ある実施形態において、本発明の共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、PECを含む。ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約90%超のカーボネート結合を有するPECを含む。ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、付録Bにおいて説明されるPEC組成物のうちの1つ以上を含む。

30

【0166】

iii) 他の脂肪族ポリカーボネート

ある実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)を含む。かかるポリマーは、エチレンオキシドおよび酸化プロピレンとのCO₂に由来するターポリマーを包含する。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)は、ランダムコポリマーである。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)は、テーパー型コポリマーである。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)は、ブロックコポリマーである。ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)組成物は、約0.5%から約99.5%の範囲のPOに対するEOの比率を含有し得る。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート) - コ - ポリ(エチレンカーボネート)組成物は、純粋なポリカーボネートに関して付録AおよびBにおいて説明されるものと同様の特性を有する。

40

【0167】

一部の実施形態において、ポリカーボネートは、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドの総重量の少なくとも約5重量%に寄与する。

【0168】

これらの実施形態のうちの一部において、ポリオレフィンは、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドの総重量の少なくとも約5重量%を成す。

50

【0169】

一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、単一のポリマーブレンドから押出される。

【0170】

一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、約100ミル以下の厚さを有する。

【0171】

局部応力または剪断速度、界面張力、組成、押出機の流動場、ならびに2つの混合ポリマー溶解物の相対粘度および溶融弾性レベルに依存して、約180,000の分子量を有するPPCでの上の場合において観察されるが、共連続的層状形態は、ポリカーボネート、およびポリカーボネートに対して様々な分子量にわたるポリオレフィンで見ることができると予想される。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、少なくとも約40,000の分子量を有する。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、約300,000以下の分子量を有する。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、約40,000から約300,000の範囲内の分子量を有する。

【0172】

局部応力または剪断速度、界面張力、組成、押出機の流動場、ならびに2つの混合ポリマー溶解物の相対粘度および溶融弾性レベルに依存して、PPCおよびLLDPEの50/50重量%ポリマーブレンドでの上の場合において観察されるが、共連続的層状形態は、約10重量%から約50重量%の分散相、特に、約20重量%から約50重量%の分散相の様々なブレンド組成物にわたって、ポリカーボネートとポリオレフィンとの間で見ることができると予想される。50重量%を上回るポリカーボネートでは、分散相は、ポリカーボネートからポリオレフィンに変化するが、同様の形態は、ポリカーボネートマトリクスに分散されているポリオレフィンの層状層で可能である。一部の実施形態において、この層状形態は、ポリカーボネートブレンドの約10重量%から約90重量%範囲のLLDPEならびに他のポリマーを有する、ポリカーボネートブレンドにおいて、適切な条件下で予想される。

【0173】

一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ポリマーブレンドの総重量の少なくとも約5重量%を構成する。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ポリマーブレンドの総重量の少なくとも約10重量%を構成する。一部の実施形態において、ポリカーボネートの量は、ブレンド全体の約10重量%から約90重量%の範囲内である。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ブレンド全体の約20重量%から約80重量%の範囲内である。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ブレンド全体の約20重量%から約50重量%の範囲内である。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、ブレンド全体の約40重量%から約60重量%の範囲内である。一部の実施形態において、他方のポリマー（1つまたは複数）は、ポリマーブレンドの総重量の少なくとも約10重量%を構成する。一部の実施形態において、他方のポリマー（複数を含む）は、ブレンド全体の約20重量%から約50重量%の範囲内である。

【0174】

一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、2つ以上のポリカーボネートを含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドは、ポリ（エチレンカーボネート）、およびポリ（プロピレンカーボネート）を含む。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、異なる分子量を有する。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、異なる化学構造を有する。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、異なる分子量および異なる化学構造を有する。

【0175】

一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、2つ以上の非ポリカーボネートポリマーを含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドフィルムは、2つ以上のポリオレフィンを含む。一部の実施形態において、ポリオレフィンは、

10

20

30

40

50

異なる分子量を有する。一部の実施形態において、ポリオレフィンは、異なる化学構造を有する。一部の実施形態において、ポリオレフィンは、異なる分子量および異なる化学構造を有する。

【0176】

一部の実施形態において、共連続的層状形態を有するポリマーブレンドは、2つ以上のポリカーボネート、および2つ以上の非ポリカーボネートポリマーを含む。一部の実施形態において、ポリマーブレンドは、2つ以上のポリカーボネート、および2つ以上のポリオレフィンを含む。

【0177】

IV) 方法

ある実施形態において、本発明は、脂肪族ポリカーボネート組成物の機械的特性を改善するための方法を提供する。ある実施形態において、かかる方法は、

a) 脂肪族ポリカーボネートを提供するステップであって、脂肪族ポリカーボネートをフィルムに作製する時、フィルムが、50%未満のASTM D882を使用して測定される固有の破断前伸長値を有することを特徴とする、ステップと、

b) 少なくとも70重量パーセントの脂肪族ポリカーボネートを含む混合物を提供するように、約30重量パーセントの結晶性または半結晶性ポリマーを混和するステップと、

c) ステップ(b)の混合物からフィルムを形成するステップと、

d) 100%超のASTM D882を使用して測定される破断前伸長値を有するフィルムを提供するように、ステップ(c)からのフィルムを延伸するステップと、を含む。

【0178】

ある実施形態において、ステップ(c)および(d)は、ブローフィルムラインにおいてフィルムを作製することによって、同時に実施される。一部の実施形態において、提供される方法は、ステップ(a)および(b)を含む。一部の実施形態において、提供される方法は、ステップ(a)、(b)、および(c)を含む。

【0179】

ある実施形態において、フィルムを形成するステップは、フィルムを押出することを含む。ある実施形態において、フィルムを形成するステップは、フィルムを鋳造することを含む。

【0180】

ある実施形態において、フィルムを延伸するステップは、フィルムを一軸延伸することを含む。ある実施形態において、フィルムを延伸するステップは、フィルムを二軸延伸することを含む。

【0181】

ある実施形態において、ステップ(b)において形成されるポリマー混合物は、本発明のポリマーブレンドの説明において上で定義されるもののうちのいずれかである。

【0182】

ある実施形態において、ステップ(a)において提供される脂肪族ポリカーボネートは、それが、35 超のTgを有することを特徴とする。

【0183】

ある実施形態において、ステップ(a)において提供される脂肪族ポリカーボネートは、ポリカーボネート鎖が、平均で、98%超のカーボネート結合を含有することを特徴とする。ある実施形態において、ステップ(a)において提供される脂肪族ポリカーボネートは、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。

【0184】

ある実施形態において、ステップ(b)において混和される半結晶性ポリマーは、ポリオレフィンを含む。ある実施形態において、ステップ(b)において混和される半結晶性ポリマーは、LDPEを含む。ある実施形態において、ステップ(b)は、約1%から約10%の半結晶性ポリマーを混和することを含む。

【0185】

10

20

30

40

50

ある実施形態において、ステップ(a)において提供される脂肪族ポリカーボネートのみから作製されるフィルムの破断前伸長値、およびステップ(d)からの最終フィルムの破断前伸長値の比率は、2超である。ある実施形態において、ステップ(a)において提供される脂肪族ポリカーボネートのみから作製されるフィルムの破断前伸長値、およびステップ(d)からの最終フィルムの破断前伸長値の比率は、3超、5超、または10超である。

【0186】

ある実施形態において、本発明の方法は、熱硬化ステップまたはアニーリングステップといった、延伸後の追加のステップを含む。さらに、延伸されたフィルムは、商品物品、包装材料等を作製するようにさらに処理することができる。ある実施形態において、本発明の方法は、フィルムを熱形成するステップを含む。例えば、厚いPPC系フィルムを延伸し、次いで、熱形成によってカップを作製するように使用することができる。一部の実施形態において、多層積層構造は、高い伸長特性を有するPPC系フィルムを使用して、作製することができる。一部の実施形態において、提供される方法は、表面処理等といった、さらなるステップを含んでもよい。例えば、フィルムは、コロナ放電、プラズマ、または金属化、積層、印刷、接着剤または他のコーティングの塗布のような、さらなる処理に対して好適な、フィルムを作製するために、業界において既知の他の修正によって、表面処理することができる。

【0187】

V) 用途

代替的に、または上で言及される用途に加えて、提供されるブレンドは、以下で説明される用途において有用である。

【0188】

一部の実施形態において、提供されるポリマーブレンドは、消費者包装物品の製造において、有用である。一部の実施形態において、消費者包装物品は、本明細書において説明されるポリマーブレンドから作製されるか、それを含有するか、またはそれでコーティングされる。包装におけるポリマーの代表的な用途、およびそれに関する概念は、Susan E. M. SelkeによるPlastics Packaging: Properties, Processing, Applications, And Regulations by (Hanser Gardner Publications; 2 edition (December 1, 2004) ISBN 978-1569903728)において説明されており、その内容は、参照することによって、本明細書に組み込まれる。

【0189】

ある実施形態において、本発明は、1つ以上のポリオレフィン組成物とともに押出される、1つ以上の脂肪族ポリカーボネート組成物を含む、包装材料を包含する。ある実施形態において、包装材料は、フィルムを含む。一部の実施形態において、フィルムは、少なくとも10重量%のポリカーボネートを含む。一部の実施形態において、フィルムは、少なくとも20重量%のポリカーボネートを含む。一部の実施形態において、フィルムは、少なくとも30重量%のポリカーボネートを含む。一部の実施形態において、フィルムは、少なくとも50重量%のポリカーボネートを含む。一部の実施形態において、フィルムは、少なくとも70重量%のポリカーボネートを含む。一部の実施形態において、フィルムは、少なくとも90重量%のポリカーボネートを含む。

【0190】

ある実施形態において、本発明の包装材料は、ブローフィルムを含む。一部の実施形態において、本発明は、押出フィルムを包含する。一部の実施形態において、フィルムは、約0.01~約100ミルの厚さである。一部の実施形態において、フィルムは、約0.1~10ミル、約0.2~5ミル、または約.5~3ミルの厚さである。

【0191】

ある実施形態において、本発明の押出ポリマーブレンドから形成されるフィルムは、食

10

20

30

40

50

品および飲料包装に対して好適である。一部の実施形態において、フィルムは、ブロー成形フィルム、鑄造フィルム、または押出フィルムである。ある実施形態において、フィルムは、剛性フィルム、延伸フィルム、または熱収縮可能なフィルムである。かかるフィルムを産生するための製造技術は、当業者に公知である。

【0192】

本明細書において説明される押出ポリマーブレンドは、ブローもしくは鑄造フィルムに対して、またはシート材料として有用である (Encyclopedia of Polymer Science and Technology, 1st Ed., vol. 7 p. 88 - 106、Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 4th Ed., vol. 11, p. 843 - 856、および Plastics Materials, 5 Ed., Butterworth-Heinemann, 252 and p. 432 ff を参照されたい)。フィルムは、単一の層または多層であってもよい。多層フィルムは、他のポリマー、接着剤等を含んでもよい。包装に関して、フィルムは、延伸ラップ、収縮ラップ、または密着ラップであってもよい。フィルムは、農業フィルム、食品包装といった、多くの用途に対して有用である。

10

【0193】

押出フィルムは、本明細書において説明されるポリマーブレンドから形成することができ、これらのフィルムは、処理、例えば、引き伸ばされる、または延伸されてもよい。一部の実施形態において、かかるフィルムは、二軸延伸される。かかる押出フィルムは、種々の種類の包装に対して有用である。

20

【0194】

ある実施形態において、フィルムは、多層フィルムの構成要素として、脂肪族ポリカーボネートを含む。ある実施形態において、ポリカーボネートは、積層フィルムにおける結合層として作用する。一部の実施形態において、ポリカーボネートは、多層フィルムにおける構造的層を提供する。ある実施形態において、フィルムは、生分解性フィルムである。一部の実施形態において、かかるフィルムは、デンプン、PHB、3PHP、PLA、または修飾セルロースといった、1つ以上の他の分解可能なポリマーと組み合わせた、ポリカーボネートを含む。ある実施形態において、ポリカーボネートを含有する層は、酸素、水蒸気、二酸化炭素、または有機分子の透過を遅延させるためのバリア層として作用する。ある実施形態において、ポリカーボネートフィルムは、食品と接触する状況において、または二次的包装材料として、のいずれかで、食品品目を包装するために使用される。

30

【0195】

ある実施形態において、ポリカーボネート含有フィルムは、多層構造物における1つ以上の層として使用される。一部の実施形態において、フィルムは、飲料ボトルといった多層包装物品における構成要素として使用される。一部の実施形態において、かかる多層ボトルは、ブロー成形によって形成される。一部の実施形態において、ポリカーボネートフィルムは、ジュースの箱、牛乳パック、および屋根型箱といった、紙ベースの液体包装物品のための内部層において使用される。ある実施形態において、フィルムは、「バッグインボックス」構造物において使用される。ある用途において、フィルムは、カラーラッパ、キャップライナ、または蓋膜といった、容器施栓構造物において使用される。

40

【0196】

ある実施形態において、可撓性パウチは、単層または多層ポリカーボネートフィルムから作製される。かかるパウチは、牛乳といった種々の液体製品、またはホットチョコレートミックスといった粉末を包装するために使用することができる。パウチは、熱融着されてもよい。それはまた、金属箔層といったバリア層を有してもよい。

【0197】

一部の実施形態において、ラップ包装フィルムは、ポリカーボネートフィルムを含有する。一部の実施形態において、フィルムは、異なる密着性を有する。かかるフィルムは、密着特性を付与するために十分な量の粘着付与剤を含有する、ポリカーボネートフィルム

50

である、外部裏面、およびほとんどまたは全く密着性を有しない外部表面という、少なくとも2つの層を含む、フィルム積層によって提供することができる。

【0198】

本明細書において説明されるポリマーブレンドは、好ましくは、食品および飲料包装における使用を目的とするが、ポリマーブレンドには、他の用途もあり得る。一部の実施形態において、ポリカーボネート含有フィルムは、包装用途のために使用される。ある実施形態において、ポリカーボネート含有フィルムは、消費者製品のための小売包装として使用される。ある用途において、ポリカーボネート含有フィルムは、気泡シート、または他の同様の梱包材料を作製するために使用される。ある実施形態において、ポリカーボネート含有フィルムは、接着剤テープのための基板として使用される。

10

【0199】

一部の実施形態において、本発明のポリカーボネート含有フィルムは、農業用フィルムとして使用される。一部の用途において、かかるフィルムは、グラウンドマルチとして使用される。ある実施形態において、ポリカーボネートを含有するグラウンドマルチは、分解可能であり、使用後に土中にすき込まれてもよい。一部の実施形態において、ポリカーボネート含有フィルムは、温室被覆材料として使用される。ある実施形態において、ポリカーボネートフィルムは、透過性または非透過性の畝被覆材料として使用される。ある実施形態において、ポリカーボネートフィルムは、ジオメンブランおよび池用ライナとして使用される。

【0200】

ある実施形態において、本発明のポリマーブレンドには、熱融着用途における実用性があり得る。一部の実施形態において、ポリカーボネート含有組成物は、リッドストック（例えば、乳製品、乾物、医療用品、および液体充填容器の包装における）として；スープ、タバコ、紙製品、および他の消費者製品といった品目のための上包として；ラベル付け用途における上覆として；ならびにプリスタパック構造物において、かかる用途のために使用されてもよい。

20

【0201】

以下のリストは、ポリカーボネート含有組成物およびブレンドに関する一部の使用である。一部の場において、ポリカーボネート以外の特定のポリマー、または一般的なポリマーに関する、かかる使用を論述する参考文献が示される。これらの場合において、その中で説明される概念は、十分に一般的であり、当業者は、概念および技術を、過度の実験を行うことなく、ポリカーボネート組成物の用途に適用することができる。これらの参考文献の各々の全体は、参照することによって、本明細書に組み込まれる。参考文献に関しては、これらが含まれる：W. Gerhartz, et al., Ed., Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5th Ed. VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim (巻およびページ番号は以下に示す)；H. F. Mark, et al., Ed., Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 4th Ed., John Wiley & Sons, New York, J. I. Kroschwitz, et al., Ed. (巻およびページ番号は以下に示す)、Encyclopedia of Polymer Science and Technology, 1st Ed., John Wiley & Sons, New York (巻およびページ番号は以下に示す)、H. F. Mark, et al., Ed., Encyclopedia of Polymer Science and Engineering, 2nd Ed., John Wiley & Sons, New York (巻およびページ番号は以下に示す)、ならびにJ. A. Brydson, ed., Plastics Materials, 5 Ed., Butterworth-Heinemann, Oxford, UK, 1989 (ページ番号は以下に示す)。

30

40

【0202】

50

一部の実施形態において、ポリカーボネート含有組成物は、低強度接着剤のための粘着付与剤として作用することができる (Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5th Ed. vol. A1, p. 235 - 236)。エラストマーブレンドおよび/または比較的低い分子量のポリカーボネート含有組成物が、これらの用途に対して好ましい。一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネート組成物またはブレンドを含有する低強度接着剤を包含する。

【0203】

一部の実施形態において、ポリカーボネート含有組成物は、ホットメルト接着剤 (Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry, 5th Ed. vol. A1, p. 233 - 234)、感圧接着剤 (同書、p. 235 - 236) のための原樹脂として、または溶剤塗布接着剤として有用であり得る。低～中分子量ポリカーボネート、およびポリカーボネートの熱可塑性ブレンドが、ホットメルト接着剤に対して好ましい。一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネート含有組成物またはブレンドを含有する、ホットメルト接着剤を包含する。

10

【0204】

ある実施形態において、ポリマーは、種々の化合物、特に、エポキシ、カルボン酸無水物 (例えば、無水マレイン酸との反応)、イソシアン酸、またはカルボン酸を含むが、これらに限定されない、官能基をもたらしものと反応させてもよい (Encyclopedia of Polymer Science and Technology, 1st Ed., vol. 12, p. 445)。ある実施形態において、ポリカーボネート含有組成物は、鎖末端に存在するヒドロキシ基を介して、修飾される。かかる官能化ポリマーは、ブレンドされる時の種々の熱可塑性および熱硬化性物質のための強化剤として有用であり得る。ポリマーがエラストマーである時、それらにグラフトされる官能基は、ポリマーを架橋するための硬化部位として使用されてもよい。無水マレイン酸でグラフトされたポリマーは、広範な材料 (ナイロン、PPO、PPO/スチレン合金、PET、PBT、POM、PLA、PHB等) のための強化剤として; 包装バリアフィルムといった、多層構造物における結合層として; ホットメルト、水分硬化可能な、および共押出可能な接着剤として; またはポリマー可塑剤として、有用である。無水マレイン酸でグラフトされた材料は、例えば、他の機能性材料を形成するように、アミンと後反応させてもよい。アミノプロピルトリメトキシシランとの反応は、水分硬化可能な材料を可能にするであろう。ジアミンおよびトリアミンとの反応は、粘度修正を可能にするであろう。

20

30

【0205】

ある態様において、ワイヤ絶縁および外被は、ポリカーボネート含有組成物またはそのブレンドから作製することができる (Encyclopedia of Polymer Science and Engineering, 2nd Ed., vol. 17, p. 828 - 842 を参照されたい)。エラストマーの場合、絶縁または外被が形成された後、ポリマーを架橋することが好ましい可能性がある。一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネート組成物またはブレンドを含有する外被または絶縁を包含する。

【0206】

ポリカーボネート組成物またはそのブレンドは、PLA、PHB、およびPVCを含むが、これらに限定されない、他のポリマーのための可塑剤または処理助剤として使用されてもよい。

40

【0207】

ポリカーボネート組成物またはブレンドは、PLA、PHB、およびポリオレフィンといった、他のポリマーのための強化剤として使用することができる。一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネート組成物またはブレンドとブレンドされるPLAを包含する。一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネート組成物またはブレンドとブレンドされるPHBを包含する。一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネート組成物またはブレンドとブレンドされるデンプンを包含する。

【0208】

50

ポリカーボネート組成物またはブレンド、特に、比較的可撓性であるものは、炭酸および非炭酸飲料のためのキャップライナ樹脂として有用である。

【0209】

一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネート組成物またはブレンドを含有する、ポリマー添加剤を包含する。ある実施形態において、本発明は、例えば、自動車での使用におけるような、塗料接着を改善するように、ポリカーボネートが添加されている、いわゆる、熱可塑性オレフィンといった、成形樹脂を含む。

【0210】

一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネート組成物またはブレンドを含む繊維を包含する。一部の実施形態において、繊維は、細デニール繊維および/またはマルチフィラメントである。これらは、溶融紡糸されてもよい。それらは、フィラメント束、不織ウェブ、織布、編布、またはステーブル繊維の形態であってもよい。一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネートを含有する布、紐、糸、または他の完成した繊維製品を包含する。

10

【0211】

一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネートブレンドを射出成形することによって作製される物品を包含する。かかる射出成形された品目としては、食品サービス容器および器具といった使い捨て品目、ならびに消費者製品、玩具、電化製品のための部品、電子機器、および自動車用途といった品目を含むが、これらに限定されないより耐久性のある品目が挙げられる。

20

【0212】

一部の実施形態において、提供されるフィルムは、包装フィルムである。一部の実施形態において、包装フィルムは、積層フィルムである。一部の実施形態において、積層フィルムは、ポリオレフィン、ポリエステル、ポリエーテル、ポリアミド、ポリスチレン、ポリ塩化ビニル、ポリエチレンテレフタレート、フッ素化ポリマー、およびこれらのうちの2つ以上の混合物から成る群より選択される、ポリマーを含む。ある実施形態において、積層フィルムは、ポリラクチド、ポリ(ヒドロキシアルカノエート)、ポリ(プロピレンカーボネート)以外の脂肪族ポリカーボネート、芳香族ポリカーボネート、ポリビニルアルコール、NYLON(登録商標)、およびこれらのうちのいずれか2つ以上の混合物から成る群より選択される、ポリマーを含む。

30

【0213】

一部の実施形態において、本発明は、ポリカーボネートを含有する、単一の1回分の小袋を包含する。ある実施形態において、かかる小袋は、石鹸またはシャンプーといった個人用ケア製品を包装するためのものである。ある実施形態において、かかる小袋は、調味料といった食品製品を包装するためのものである。

【実施例】

【0214】

例示

実施例 1

構造的に精密なPPCを、4"フィルムダイを有する単一スクリュウ押出機に送給した。押出機温度は、170 に維持した。100ミクロン、200ミクロン、500ミクロン、および900ミクロンのフィルムを、ダイ間隔を調節することによって得た。フィルムは、水冷ロールを有するロールシステムにそれらを通させることによって冷却した。得られたフィルムは、透明かつ丈夫であり、種々の物品を熱形成するために使用され得る。真空システムを具備するIllig SB53-C1熱成形機を使用して、熱形成によってこれらのPPCフィルムの各々から小さなコップを形成した。熱形成において、処理は、温度によって制御され、300 に設定されたセラミックヒータの放射によって加熱されるPPCシートの温度を監視する高温計を通じて達成される。つまり、雄型は、上方へ移動し、表面温度が設定点、この場合は130 に到達する時、真空がオンになる。15、25、および135秒の加熱時間は、それぞれ0.1mm、0.2mm、および0.

40

50

9 mm厚のフィルムに対して使用された。

【0215】

実施例 2

実施例 1 において説明されるものと同様の PPC (Novomer PPC) を、送給ホッパを通じて、射出成形機械に送給した。バレルへ入れると、樹脂を 170 °C まで加熱し、鋳型に送給する。ドッグボーンおよび平坦なバーを成形して、ASTM 規格ごとに試験した。39.5 MPa の降伏点での引張強度、3.24 % の降伏点での伸長、および 1447 MPa の引張係数を測定した (ASTM D638 - 08 (ISO 527))。2525 MPa の曲げ弾性率を測定した (ASTM D790 (ISO 178))。0.6721 ft - lb / インチのノッチ付きアイゾッド衝撃を測定した (ASTM D256、ISO 180)。最終的に、33 °C の熱たわみ温度、または荷重たわみ温度を測定した (ASTM D1238、ISO 1133)。

10

【0216】

実施例 3

構造的に精密な PPC (Novomer PPC) を、ポリオレフィンとブレンドし、フィルム、射出成形品目、およびブロー成形ボトルを含む、種々の物品に作製した。予想外に、構造的に精密な PPC は、押出プロセスに耐え、ポリオレフィンとの有用なブレンドを提供した。実施例 1 において説明されるものと同様の PPC を、二軸スクリュウ押出機において、低密度ポリエチレン (LLDPE)、高密度ポリエチレン (HDPE)、またはポリプロピレン (PP) のいずれかと 30 または 50 重量% でブレンドした。押出機の温度は、LLDPE に関しては 180 °C に、HDPE および PP に関しては 190 °C に設定した。相溶化剤を使用して、PPC およびポリオレフィンの強化された分散を可能にした。典型的に、相溶化剤は、分散相の最大 20 ~ 22 % で充填した。このため、50 / 50 ポリオレフィン / PPC ブレンドは、45 / 45 / 10 : : ポリオレフィン / PPC / 相溶化剤として調合し、70 / 30 ポリオレフィン / PPC ブレンドは、66 / 28 / 6 : : ポリオレフィン / PPC / 相溶化剤として調合した。無水物修飾 LLDPE は、LLDPE ブレンドおよび HDPE のための相溶化剤として使用された一方、無水物修飾 PP は、PP ブレンドのための相溶化剤として使用された。これらのブレンドのペレットは、溶解物を二軸スクリュウ押出機からストランドダイを通して、ペレタイザに通過させることによって作製した。次いで、これらのペレットを使用して、純粋な PPC に関して上

20

30

【表 1】

【表1】

	降伏点引張強度	降伏点伸長	曲げ弾性率	引張係数	ノッチ付き アイゾッド衝撃
単位	MPa	%	MPa	MPa	ft-lb/インチ
PPC	39.5	3.24	2525	1447	0.6721
LLDPE	11.2	64	-	164	破断無し
70/30 LLDPE/PPC	12.9	6.21	344	437	5.73
50/50 LLDPE/PPC	15.4	3.72	823	684	2.713
HDPE	20.6	8	664	563	2.25
70/30 HDPE/PPC	23.6	5.79	1184	817	1.19
50/50 HDPE/PPC	25.9	3.23	1493	931	1.016
PP	32.5	8	1317	930	1.5
70/30 PP/PPC	28.9	4.22	1763	1024	1.58
50/50 PP/PPC	28.8	3.76	2009	1137	1.62

10

20

【0217】

Exceed (登録商標) 1018 (ExxonMobil, Irving, TX) として市販される LLDPE を、一部の試験において、ポリオレフィンとして使用した。Exceed (登録商標) 1018 は、メタロセン触媒ポリエチレン樹脂 (エチレン-ヘキセンコポリマー) であり、良好な引張強度、衝撃強度、および穿刺抵抗を有するフィルムを形成するために使用される。LLDPE は、 0.918 g/cm^3 の密度、 1.0 g/10分 の溶融指数 ($190 / 2.16 \text{ kg}$)、および 246°F のピーク融解温度を有するとして報告される。

30

【0218】

Alathon (登録商標) M5350 (Lyondell Chemical Co., Houston, TX) として市販される HDPE を、一部の試験において、ポリオレフィンとして使用した。Alathon (登録商標) M5350 は、高い衝撃強度および良好な処理安定性を有する、狭い分子量分布のコポリマーである。HDPE は、 0.953 g/cm^3 の密度および 4.5 の溶融指数を有するとして報告される。

【0219】

DOW H110-02N (Dow Chemical Co., Midland, MI) として市販される PP を、一部の試験において、ポリオレフィンとして使用した。DOW H110-02N は、良好な衝撃および剛性のバランス、ならびに優れた処理可能性を有する、ポリプロピレンホモポリマーである。PP は、 0.9 g/cm^3 の密度および 2.2 g/10分 の溶融指数 (230) を有するとして報告される。

40

【0220】

実施例 4

約 $180,000$ の平均分子量を有する構造的に精密な PPC を、以下の試験において、ポリカーボネートとして使用した。

【0221】

ポリカーボネートおよび相溶化剤を、処理前に、真空オーブンにおいて 95°F で 48 時間乾燥させた。材料 (ポリカーボネート、ポリオレフィン、および相溶化剤) を、乾燥ブレンドし、二軸スクリュウ送給器によって、ZSK-30 共回転二軸スクリュウ押出機

50

(TSE, Werner & Pfleiderer, Stuttgart, Germany) に送給した。水浴をTSEの端部に取設し、押出物ストランドをペレット化した。3つのブレンドを調製し、試験した。第1のブレンドである、相溶化剤としてAdmer AT2543A (Mitsui Chemicals, Tokyo, Japan) を含む、50/50重量%のLLDPE/PPCは、170 の温度で、10lb/時の送給速度および110rpmのスクリー速度で押出した。第2のブレンドである、相溶化剤としてAdmer AT2543Aを含む、50/50重量%のHDPE/PPCは、170 の温度で、10lb/時の送給速度および110rpmのスクリー速度で押出した。第3のブレンドである、相溶化剤としてAdmer QF551A (Mitsui Chemicals, Tokyo, Japan) を含む、50/50重量%のPP/PPCは、180 の温度で、10lb/時の送給速度および110rpmのスクリー速度で押出した。相溶化剤レベルは、全ての場合において、分散相の1~10%に維持した。

10

【0222】

フィルム押出に関して、一軸スクリー押出機(D=1.8cm、L/D=15; C. W. Brabender Instruments, Inc., South Hackensack, NJ) を使用して、押出機の端部に取設される6インチのシートダイを使用して、フィルムを調製した。フィルムの厚さを、ダイ間隔の幅を調節することによって変化させて、200 μ mおよび500 μ m厚のフィルムを作製した。次いで、フィルムを、3層の引取ロールによって回収した。ロールの温度は、循環水浴によって、60 に維持した。フィルムの厚さもまた、スクリー速度およびロール上の引取速度によって調節可能であった。上で説明される3つのブレンドに加えて、PPC、LLDPE、HDPE、およびPPの押出フィルムを形成した。PPCフィルムは、170 で押出した。LLDPEフィルムは、200 で押出した。HDPEフィルムは、230 で押出した。PPフィルムは、235 で押出した。Admer AT2543Aを含む50/50のLLDPE/PPC、およびAdmer AT2543Aを含む50/50のHDPE/PPCフィルムは、180 で押出した。Admer QF551Aを含む50/50のPP/PPCフィルムは、190 で押出した。

20

【0223】

ポリマーフィルムの酸素透過性を、23 および50%の相対湿度で測定した。純粋なPPCフィルムは、1日6.2cc mil/100in²の酸素透過性を示した。純粋なPECフィルムは、1日0.59cc mil/100in²の酸素透過性を示した。純粋なLLDPEフィルムは、1日5.13cc mil/100in²の酸素透過性を示した。純粋なHDPEフィルムは、1日1.36cc mil/100in²の酸素透過性を示した。純粋なPPフィルムは、1日1.64cc mil/100in²の酸素透過性を示した。LLDPE/PPCフィルムは、純粋なLLDPEよりも12.5のバリア改善率で、1日4.1cc mil/100in³の酸素透過性を示した。HDPE/PPCフィルムは、純粋なHDPEよりも1.7のバリア改善率で、1日8.1cc mil/100in²の酸素透過性を示した。PP/PPCフィルムは、純粋なPPよりも4.7のバリア改善率で、1日3.5cc mil/100in²の酸素透過性を示した。

30

【0224】

純粋な構成要素の酸素透過性に基づく、ポリマーブレンドフィルムの予想される酸素透過性は、体積加算モデルおよびMaxwellモデルという、2つの異なるモデルを使用して計算した。

体積加算モデルは、以下の方程式によって定義され、

【数1】

$$P_{\text{ブレンド}} = \text{vol}f_r P_d + (1 - \text{vol}f_r) P_m \quad (1)$$

Maxwellモデルは、以下の方程式によって定義され、

40

【数 2】

$$P_{\text{ブレンド}} = \frac{P_m(P_d + 2P_m - 2\text{vol}f r_d(P_m - P_d))}{P_d + 2P_m + \text{vol}f r_d(P_m - P_d)} \quad (2)$$

式中、 $P_{\text{ブレンド}}$ は、ブレンドの透過性であり、 P_m は、マトリクス相を通る透過性であり、 P_d は、分散相を通る透過性であり、 $\text{vol}f r_d$ は、分散相の体積分率である。LLDPE / PPC に対する予測される酸素透過性は、体積加算モデルによっては 301 であり、Maxwell モデルによっては 248 であった。HDPE / PPC に対する予測される酸素透過性は、体積加算モデルによっては 82 であり、Maxwell モデルによっては 67 であった。PP / PPC に対する予測される酸素透過性は、体積加算モデルによ

10

【0225】

走査電子顕微鏡法 (SEM) も、ポリマーフィルムで実施した。図 2 は、LLDPE / PPC ポリマーブレンドフィルムに関する分散相の共連続的層状形態を示す。図 3 は、HDPE / PPC ポリマーブレンドフィルムに関する HDPE 35 のマトリクスにおける PPC 30 の島を示す。LLDPE / PPC ポリマーブレンドフィルムに関する共連続的形態は、蛇行した経路が、フィルムを通る O_2 透過性のために生成されるため、改善されたバリア特性につながる。酸素は、分散された PPC 層 20 を通って容易に拡散することができず、その形態のために、低バリア LLDPE マトリクス 25 を通る、迅速な拡散経路を見出さない。このため、50 / 50 の LLDPE / PPC フィルムを通る O_2 の透過性は、二相系を通る透過性に関して、体積加算モデルまたは Maxwell モデルを使用して予想されるであろうものよりもはるかに低い。

20

【0226】

PPC が分散相である、50 / 50 の LLDPE / PPC で、図 2 において見られる形態は、50 / 50 の HDPE - PPC の顕微鏡写真で図 3 において見られる典型的な海島 (islands-in-a-sea) 形態とは異なる。2つのポリマーが相互において分散される時、図 3 において見られるように、球状の分散相の形成は、エントロピー的に有利である。しかしながら、図 2 におけるようなある場合において、分散相が、LLDPE - PPC の場合において観察されるような、文献において層状または共連続的形態としても既知である、層状形態に延伸することが見られている。この層状共連続的形態は、分散相につながり、薄いシート様の層 (典型的に、1 ミクロンの厚さ未満であり、しばしば、0.2 ~ 0.5 ミクロンの厚さ未満である) を形成する。これは、フィルムを通るガス (酸素のような) の拡散の蛇行した経路を創出し、それにより、フィルムを通るガス透過率を、フィルムにおける球状ドメインを有する分散相を有するフィルムから予想されるよりもはるかに超えて低下させる。パレットまたは層状層が大きい、有限の長さ / 幅比率を有する、薄いパレット様形態は、ガス透過率を劇的に低減することができるということが示されている (本明細書において、参照することにより組み込まれる、Hopfenberg, H. B. and Paul, D. R., in Polymer Blends, D. R. Paul and S. Newman, eds., Vol. 1, Chapter 10, Academic Press, New York, 1978 を参照されたい)。

30

40

【0227】

層状共連続的層状形態につながる、液滴の延伸および合体の変形態様が、他のポリマー系に関して研究されている (Subramanian, P. M., "Permeability barriers by controlled morphology of polymer blends", Polymer Engineering & Science, Vol. 25, No. 8, pp. 483 - 487, 1985, Kamal, M. R. et al., "The development of laminar morphology during extrusion of polymer blends", Polymer Engineering & Science, Vol.

50

35, No. 1, pp. 41 - 51, 1995、および Lee, S. Y. and Kim, S. C., "Laminar morphology development and oxygen permeability of LDPE/EVOH blends", Polymer Engineering & Science, Vol. 37, No. 2, pp. 463 - 475, 1985を参照されたく、これらは全て、本明細書において、参照することにより組み込まれる)。

【0228】

実施例 5

99%超のカーボネート結合を有し、2%未満のプロピレンカーボネートを含有する、185,000の平均分子量のPPCを、二軸スクリュウ押出機において、5%のLDPE (Dow LDPE 5004IならびにDow LDPE 640I)と混合した。任意に、官能化ポリオレフィン相溶化剤として使用することができる。例えば、Admer AT2543Aを、一部の場合において、0.5重量%から1重量%のレベルで、相溶化剤として使用した。

【0229】

配向フィルム：

次いで、混合されたPPC-LDPEブレンドを、2つの異なる方法で、配向フィルムに作製した。

a) ブローフィルムプロセス：PPC-LDPEブレンドを、ブローフィルムラインに送給して、ブローフィルムを作製した。

約2~3のブローアップ比率が観察され、典型的なフィルムの厚さは、1から1.5ミルであった。次いで、フィルムを、ポリマーフィルムに関する引張および伸長特性を提供するASTM D882によって試験した。

b) 二軸延伸前の鑄造フィルム：PPC-LDPEブレンドを、7ミル厚のフィルムに鑄造した。次いで、これを、フィルムをセ氏40~80度、より好ましくは、セ氏50~70度の温度に加熱し、次いで、同時に両方向に延伸することによって、Iwamoto二軸フィルム延伸機械において二軸延伸した。典型的に、フィルムは、元の長さの1.5倍~6-10倍に延伸することができる。一実施例において、フィルムを、2分間、セ氏58度に保持し、次いで、100mm/分の最大速度でもって、両方向に1.5%/秒の歪み速度で延伸した。フィルムは、両方向に元の長さの2.5倍に延伸させた。鑄造されたままの7ミルのフィルム、ならびに二軸延伸されたフィルムの両方を、ポリマーフィルムに関する引張および伸長特性を提供するASTM D882によって試験した。

【0230】

ブローされたPPC系フィルムに関するASTM D882によるデータを、表2において以下で一覧にする。

【表2】

【表2】

ポリマー組成物	引張強度、MPa	破断時伸長、%
純粋な PPC	45	20
純粋な LDPE	12	120
95% PPC, 5% LDPE	50	212
94.5% PPC, 5% LDPE, 0.5% Admer	52	195
95% PPC + 5% Ecoflex(ポリ(ブチレンアジペート-コーテレフタレート)	41	208
94% PPC + 5% Ecoflex + 1% Joncryl	44	197
79% PPC + 20% Ecoflex + 1% Joncryl	38	254

【0231】

表2において見ることができるよう、本発明に従うフィルムは、ブレンドされていないフィルムに対して、高い破断時伸長値を呈した。予想外に、ブレンドの伸長特性は、時

折、個々の構成要素の値を超過する。

【0232】

フィルムを鑄造し、次いでそれを二軸方向に延伸すること（連続してまたは同時に）は、表3において以下で示されるように、破断時伸長における同様の改善を提供する。

【表3】

【表3】鑄造フィルム:そのままおよび同時二軸延伸後。

組成物	引張強度、MPa	破断時伸長、%	引張係数、MPa
純粋な PPC	34	3	3702
純粋な PPC 繰返し	34	7	3751
純粋な PPC-2.5 倍に二軸延伸	52	2	3863
純粋な LDPE	12	209	294
94% PPC + 5% LDPE + 1% Admer AT2543A	33	3	3677
94% PPC + 5% LDPE + 1% Admer AT2543A;繰返し	37	8	3537
94% PPC + 5% LDPE + 1% Admer AT2543A ¹ 、2.5 倍に二軸延伸	45	144	3874

¹ Admer AT2543Aは、無水物官能化ポリエチレン(Mitsuiから)である。

10

【0233】

表2に示されるように、二軸延伸は、純粋なPPC単独に関して、破断時伸長を改善しなかった。しかしながら、二軸延伸は、「PPC + 5% LDPE」に関しては、破断時伸長を有意に改善する。ポリオレフィンに勝るPPCの引張強度および係数の利点は、依然として、5% LDPEの添加で保持される。

20

【0234】

先に言及される参考文献の全ては、本明細書において、参照することにより組み込まれる。

【0235】

本明細書において説明される本発明の実施形態は、本発明の原理の適用を例解するものに過ぎないということが理解されるものとする。例解される実施形態の詳細への参照は、それ自体が本発明に不可欠であるとして見なされるそれらの特性を列挙する請求項の範囲を限定することを意図しない。

30

【0236】

付録A:

本発明の押出ブレンドにおける使用に好適なPPCの説明:

以下の説明は、共同所有される国際特許出願公開第WO 2010/060038号から適合されており、この全体は、参照することによって、本明細書に組み込まれる。

【0237】

一部の実施形態において、ポリマーブレンドにおけるポリカーボネートは、反応パラメータの慎重な制御でもって作製される、有利な特性を有する、PPCである。例えば、ある反応パラメータのかかる制御は、以前のPPC組成物よりも構造的に精密であるPPCにつながる。予想外に、この構造的に精密なPPCは、過去にPPCの性能が乏しかった多数の用途における材料の使用を可能にする、改善された処理特性を有する。ある実施形態において、ポリマーブレンドは、構造的に精密なPPCから形成され、PPCは、高い頭尾比率、低いエーテル結合含有量、狭い多分散性、および低い環状カーボネート含有量を有する。これらの物品が作製されるPPC組成物は、典型的に、不均一な垂鉛触媒系の存在下で、酸化プロピレンおよび二酸化炭素の重合によって形成される、先のPPC組成物から、それらを区別する、物理的特性を有する。

40

【0238】

一部の実施形態において、PPCは、先行技術からのあまり構造的に精密でないポリ(プロピレンカーボネート)組成物に対して、改善された処理および性能特性を有する。こ

50

これらの先行技術の材料は、より大きなパーセンテージのエーテル結合、より低い頭尾比率、より広い分子量分布、より高い環状カーボネート含有量、またはこれらのうちのいずれか2つ以上の組み合わせを含有する。一部の実施形態において、PPCは、先行技術のポリ(プロピレンカーボネート)組成物が劣化するか、またはそうでなければ性能が乏しい条件下で、射出成形、押出、溶解処理、ブローイング、熱形成、発泡、および鋳造を含むが、これらに限定されない手段によって処理されることが可能である。

【0239】

一部の実施形態において、それにより産生される、得られるポリ(プロピレンカーボネート)含有ブレンドおよびフィルムは、より高い強度、熱変形に対するより少ない傾向、改善されたガスバリア特性、より高いガラス転移温度、およびこれらのうちの2つ以上の組み合わせを含むが、これらに限定されない、予想外に改善された物理的特性を有する。

10

【0240】

提供されるポリマーブレンドおよびフィルムに関する本開示において、「構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)」および「ポリ(プロピレンカーボネート)」という用語は、別途記載がない限り、交換可能に使用されるということが理解されよう。

【0241】

ある実施形態において、PPCは、それが、高い頭尾比率を有することを特徴とする。一部の実施形態において、PPCは、それが、高いパーセンテージのカーボネート結合を有することを特徴とする。一部の実施形態において、PPCは、それが、狭い多分散性指数を有することを特徴とする。ある実施形態において、PPCは、それが、非常に低レベルの環状カーボネートを含有することを特徴とする。

20

【0242】

構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)が高い頭尾比率によって特徴付けられるこれらの実施形態において、ポリマーは、平均で、頭尾配向される、約80%超の隣接するモノマー単位を有する。ある実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PPCにおける約85%超の隣接するモノマー単位は、頭尾配向される。一部の実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PPCにおける約90%超の隣接するモノマー単位は、頭尾配向される。一部の実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PPCにおける約95%超の隣接するモノマー単位は、頭尾配向される。一部の実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PPCにおける本質的に全ての隣接するモノマー単位は、頭尾配向される。

30

【0243】

構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)が高いパーセンテージのカーボネート結合によって特徴付けられるこれらの実施形態において、ポリマーは、平均で、カーボネート結合を介して接続される約90%超の隣接するモノマー単位、および約10%未満のエーテル結合を有する。ある実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PPCにおける約95%超の隣接するモノマー単位は、カーボネート結合を介して接続される。一部の実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PPCにおける約97%超の隣接するモノマー単位は、カーボネート結合を介して接続される。一部の実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PPCにおける約99%超の隣接するモノマー単位は、カーボネート結合を介して接続される。一部の実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PPCにおける本質的に全ての隣接するモノマー単位は、カーボネート結合を介して接続される。ある実施形態において、ポリマーブレンドおよびフィルムは、カーボネート鎖から別個のプロセスにおいて形成されるポリエーテル部分を含むしてもよく、かかる場合、ポリエーテル部分のエーテル結合は、典型的に、CO₂および酸化プロピレンの不完全な共重合から生じる、上で説明されるエーテル結合とは異なることが理解されるものとする。

40

【0244】

50

構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)が狭い多分散性指数(PDI)によって特徴付けられる、それらの実施形態において、PPCは、約2未満のPDIを有する。ある実施形態において、PPCは、約1.8未満のPDIを有する。一部の実施形態において、PPCは、約1.5未満のPDIを有する。一部の実施形態において、PPCは、約1.4未満、約1.2未満、または約1.1未満のPDIを有する。ある実施形態において、PPCは、約1.0~約1.2のPDIを有する。

【0245】

構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)が低い環状カーボネート含有量によって特徴付けられる、それらの実施形態において、PPCは、約5%未満の環状カーボネート含有量を有する。ある実施形態において、PPCは、5%未満のプロピレンカーボネートを含有する。一部の実施形態において、PPCは、3%未満のプロピレンカーボネートを含有する。一部の実施形態において、PPCは、1%未満のプロピレンカーボネートを含有する。ある実施形態において、PPCは、プロピレンカーボネートを本質的に含有しない。

10

【0246】

一部の実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、それが、高い頭尾比率、高いパーセンテージのカーボネート結合、狭い多分散性指数、および低い環状カーボネート含有量から成る群より選択される、2つ以上の特性の組み合わせを有することを特徴とする。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)は、それが、高い頭尾比率および高いパーセンテージのカーボネート結合の組み合わせを有することを特徴とする。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)は、それが、高い頭尾比率および狭い多分散性指数の組み合わせを有することを特徴とする。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)は、それが、高い頭尾比率および低い環状カーボネート含有量の組み合わせを有することを特徴とする。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)は、それが、狭い多分散性指数および高いパーセンテージのカーボネート結合の組み合わせを有することを特徴とする。一部の実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)は、それが、高い頭尾比率、高いパーセンテージのカーボネート結合、および狭い多分散性指数の組み合わせを有することを特徴とする。

20

【0247】

構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、ポリマーブレンドおよびポリマーフィルムにおいて、様々な分子量を有してもよい。特定の用途に関して、性能および処理特性の最適な組み合わせを得るために、より高いまたはより低い分子量の材料を使用することが望ましい場合がある。かかる選択プロセスは、当業者には公知である。ポリマーの分子量は、分子量数(M_n)によって表すことができる。本明細書において説明されるような高分子量PPCは、一般的に、約 5×10^4 g/mol超の M_n を有する。本明細書において説明されるような低分子量PPCは、約 1×10^3 ~ 約 5×10^4 g/molの M_n を有する。

30

【0248】

ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)は、比較的高い M_n を有する熱可塑性物質である。ある実施形態において、構造的に精密な熱可塑性ポリ(プロピレンカーボネート)は、約 5×10^4 g/molを上回る M_n を有する。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)は、約 1×10^5 g/molを上回る M_n を有する。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)は、約 5×10^4 g/mol ~ 約 2×10^7 g/molの M_n を有する。

40

【0249】

ある実施形態において、ポリマーブレンドおよびフィルムは、約40,000 ~ 約400,000 g/molの分子量を有する、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドおよびフィルムは、約50,000 ~ 約350,000 g/molの分子量を有する、構造的に精密なポリ(プロピレンカー

50

ポネート)を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドおよびフィルムは、約100,000~約300,000 g/molの分子量を有する、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、 M_n は、約150,000から約250,000 g/molの範囲内である。一部の実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、約160,000~約240,000 g/molの M_n を有する。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)は、約180,000~約220,000 g/molの M_n を有する。ある実施形態において、ポリ(プロピレンカーボネート)は、約180,000 g/molの M_n を有する。

【0250】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、以下の特性の組み合わせを有する：約60,000から約400,000 g/molの範囲内の M_n 、95%を上回るカーボネート結合含有量、約85%超の頭尾比率、約1.5未満の多分散性指数、および約5%を下回る環状カーボネート含有量。

10

【0251】

一部の実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、以下の特性の組み合わせを有する：約60,000から約100,000 g/molの範囲内の M_n 、95%を上回るカーボネート結合含有量、約85%超の頭尾比率、約1.5未満の多分散性指数、および約5%を下回る環状カーボネート含有量。

【0252】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、以下の特性の組み合わせを有する：約80,000 g/molの M_n 、98%を上回るカーボネート結合含有量、約85%超の頭尾比率、約1.2未満の多分散性指数、および約2%を下回る環状カーボネート含有量。

20

【0253】

一部の実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、以下の特性の組み合わせを有する：約120,000から約250,000 g/molの範囲内の M_n 、95%を上回るカーボネート結合含有量、約85%超の頭尾比率、約1.5未満の多分散性指数、および約5%を下回る環状カーボネート含有量。

【0254】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、以下の特性の組み合わせを有する：約180,000 g/molの M_n 、98%を上回るカーボネート結合含有量、約85%超の頭尾比率、約1.2未満の多分散性指数、および約2%を下回る環状カーボネート含有量。

30

【0255】

一部の実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、ある程度の立体規則性を有する。一部の実施形態において、PPCは、少なくとも部分的にイソタクチックである。一部の実施形態において、PPCは、少なくとも部分的にシンジオタクチックである。ある実施形態において、PPCは、実質的にイソタクチックである。一部の実施形態において、PPCは、イソタクチックまたはシンジオタクチックPPCとの、アタクチックPPCのブレンドである。

40

【0256】

ある実施形態において、構造的に精密なPPCは、ブレンドにおける各PPC組成物が、異なる平均分子量を有することを特徴とする、2つ以上のPPC組成物のブレンドを含む。ある実施形態において、ポリカーボネート構成要素は、約100,000 g/molを下回る M_n を有するより低い分子量のPPCとの、約150,000~約400,000 g/molの M_n を有する高分子量PPCのブレンドを含む。ある実施形態において、ポリカーボネート構成要素は、約30,000 g/mol~約80,000 g/molの M_n を有するより低い分子量のPPCとの、約150,000~約250,000 g/molの M_n を有する高分子量PPCのブレンドを含む。ある実施形態において、かかるブレンドの各構成要素は、狭い多分散性を有する。ある実施形態において、ブレンドの高分

50

子量および低分子量構成要素の PDI は、独立して測定される時、各々、1.2 未満である。ある実施形態において、かかるブレンドは、低および高分子量を有する PPC ポリマーの個別の試料を混合することによって産生される。

【0257】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、40 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、41 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、42 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、43 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、44 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、45 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。

10

【0258】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、亜鉛含有触媒以外の触媒を使用して形成される。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、検出可能な亜鉛残基を含有しない。

【0259】

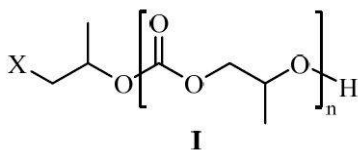
一部の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートは、遷移金属触媒の存在下で、エポキシドおよび二酸化炭素の共重合によって得られる。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、金属サレン触媒を使用して形成される。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、コバルトサレン触媒を使用して形成される。好適な触媒および方法としては、米国特許第7,304,172号、および公開されたPCT出願第WO/2010/022388A2号において説明されるものが挙げられ、これらの各々の内容全体は、参照することによって、本明細書に組み込まれる。

20

【0260】

一部の実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、式Iによって表される構造を有するポリマー鎖を含み、

【化5】



30

式中、Xは、エポキシドを開環することができる任意の求核剤の結合形態に対応する部分であり、nは、約10から約40,000の整数である。ある実施形態において、構造IにおけるXは、ハロゲン化物、アジド、またはカルボン酸塩、スルホン酸塩、フェノール、およびアルコキシドの群から成る任意に置換された基から成る群より選択される。一部の実施形態において、nは、約50から約3,000である。

40

【0261】

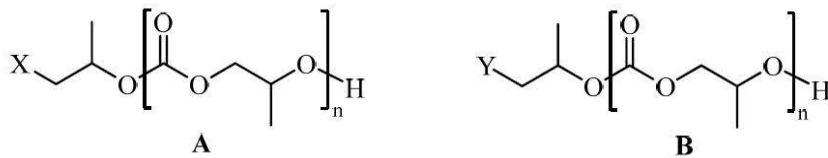
ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)ポリマーは、2つ以上の異なるポリマー鎖タイプの混合物として存在し、異なる鎖タイプは、2つ以上の異なる鎖末端基の存在、および/またはポリマー鎖内に埋め込まれる小分子ポリマー開始分子の存在、非存在、もしくは相違によって、見分けられる。

【0262】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、それが、2つのポリマー鎖タイプAおよびBを含むことを特徴とし、タイプは、それらの末端基において異なる。ある実施形態において、ポリマー鎖タイプAおよびBは、以下の式を有し、

50

【化6】

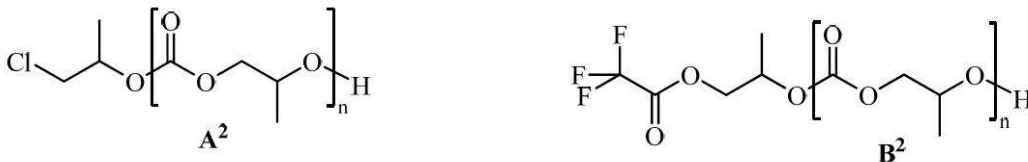


式中、 n は、上で定義されるとおりであり、 $-X$ および $-Y$ は、各々、エポキシドを開環することができる求核剤を表し、 $-X$ および $-Y$ は、異なる。

【0263】

ある実施形態において、 X および Y は、独立して、ハロゲン化物、アジド、またはカルボン酸塩、スルホン酸塩、フェノール、およびアルコキシドから成る群より選択される任意に置換された基から成る群より選択される。ある実施形態において、 X は、ハロゲン化物であり、 Y は、カルボン酸塩、スルホン酸塩、フェノール、およびアルコキシドから成る群より選択される、任意に置換された基である。ある実施形態において、 X は、ハロゲン化物であり、 Y は、カルボン酸塩である。ある実施形態において、 X は、塩化物であり、 Y は、カルボン酸塩である。ある実施形態において、 X は、塩化物であり、 Y は、ギ酸塩、酢酸塩、安息香酸塩、トリフルオロ酢酸、およびペンタフルオロ安息香酸塩から成る群より選択される。ある実施形態において、 X は、塩化物であり、 Y は、トリフルオロ酢酸であり（構造A²およびB²として以下に図示）、

【化7】



式中、 n は、上で定義されるとおりである。

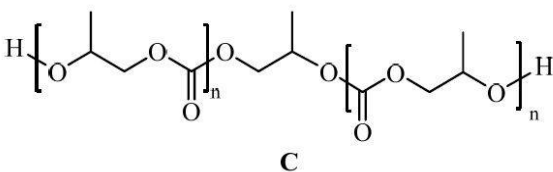
【0264】

ある実施形態において、鎖タイプAとBとの間の比率は、約1:3から約3:1の範囲である。ある実施形態において、鎖タイプAとBとの間の比率は、約1:2から約2:1の範囲である。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、鎖タイプAおよびBのほぼ等モルの混合物を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、鎖タイプA²およびB²のほぼ等モルの混合物を含む。

【0265】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプCの鎖を含み、

【化8】



式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりである。

【0266】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプAまたはAおよびBの鎖と組み合わせて、タイプCの鎖を含む。ある実施形態において、タイプAまたはAおよびBの鎖に対する、タイプCの鎖の比率は、（例えば、比率C:Aま

10

20

30

40

50

たは $C : [A + B]$) 約 0.1 : 1 から約 100 : 1 の範囲である。ある実施形態において、この比率は、約 1 : 1 ~ 約 10 : 1 である。ある実施形態において、この比率は、約 2 : 1 ~ 約 5 : 1 である。

【0267】

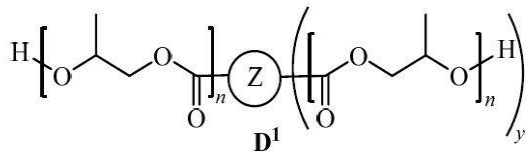
一部の実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、それらの中に埋め込まれるポリマー開始部分を有する、タイプDの鎖を含む。ある実施形態において、埋め込まれたポリマー開始部分は、ポリカーボネート鎖のほぼ中心に位置する(換言すると、その部分は、2つ以上のポリ(プロピレンカーボネート)鎖に結合され、統計的に、各鎖は、ほぼ等しい長さである)。ある実施形態において、タイプDの鎖は、埋め込まれたポリマー開始部分に結合される、2つのポリカーボネート鎖を有する、線状ポリマー鎖である。ある実施形態において、タイプDの鎖は、埋め込まれたポリマー開始部分に結合される3つ以上のポリカーボネート鎖を有する、星型ポリマーである。

10

【0268】

ある実施形態において、タイプDの鎖は、式D¹を有し、

【化9】



20

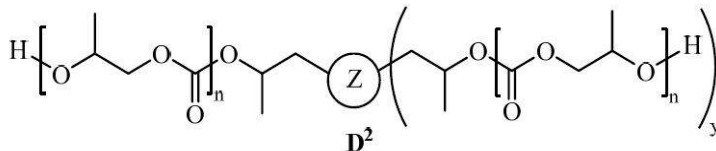
式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりであり、 y は、いくつの追加の個々のポリカーボネート鎖が、埋め込まれたポリマー開始部分に結合されるかを示す、1から5の整数であり(例えば、埋め込まれたポリマー開始部分に結合されるポリ(プロピレンカーボネート)鎖の総数は、2から6の範囲である)、 Z は、ポリマー鎖を開始するように(例えば、それぞれ、酸素、窒素、硫黄、または炭素求核剤から、カーボネート、カルバメート、チオカーボネート、またはエステルを形成するように)、2つ以上の部位において、二酸化炭素と反応することかできる、任意の多官能性分子である。ある実施形態において、タイプD¹のポリマーに対する y の値は、1である。ある実施形態において、タイプD¹のポリマーに対する y の値は、2である。ある実施形態において、タイプD¹のポリマーに対する y の値は、3である。

30

【0269】

一部の実施形態において、タイプDの鎖は、式D²を有し、

【化10】



40

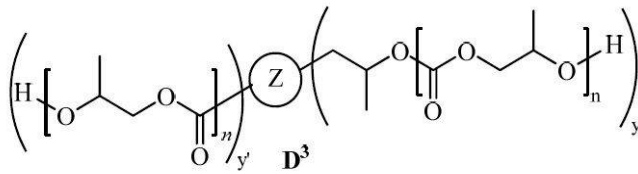
式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりであり、 y は、いくつの追加の個々のポリカーボネート鎖が、埋め込まれたポリマー開始部分に結合されるかを示す、1から5の整数であり(例えば、埋め込まれたポリマー開始部分に結合されるポリ(プロピレンカーボネート)鎖の総数は、2から6の範囲である)、 Z は、ポリカーボネート鎖の形成(例えば、それぞれ、エーテル、アミン、チオエーテル、または炭素・炭素結合を形成するように、それぞれ、酸素、窒素、硫黄、または炭素求核剤によって)を開始するように、エポキシドと、2つ以上の部位において、反応することができる、任意の多官能性分子である。ある実施形態において、タイプD²のポリマーに対する y の値は、1である。ある実施形態において、タイプD²のポリマーに対する y の値は、2である。ある実施形態において、タイプD²のポリマーに対する y の値は、3である。

50

【0270】

一部の実施形態において、タイプDの鎖は、式D³を有し、

【化11】



式中、各nは、独立して、上で定義されるとおりであり、yおよびy'は、各々独立して、0から6の整数であり、yおよびy'の合計は、少なくとも2であり、Zは、それぞれ、構造D¹およびD²に関して上で説明されるように、ポリカーボネート鎖の形成を開始するように、二酸化炭素またはエポキシドと、2つ以上の部位において、反応することができる、任意の多官能性分子である。ある実施形態において、タイプD³のポリマーに対するy'の値は、2である。ある実施形態において、タイプD³のポリマーに対するyの値は、2である。ある実施形態において、タイプD³のポリマーに対して、yまたはy'のうちの一方の値は、2であり、他方の値は、0である。一部の実施形態において、yおよびy'の合計は、2超である。

10

【0271】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、式Aの鎖、および式D³の鎖を、約1:50から約50:1の比率で含有する。ある実施形態において、式D³の鎖に対する、式Aの鎖の比率は、1:50から1:1の範囲である。ある実施形態において、式D³の鎖に対する、式Aの鎖の比率は、1:10から10:1の範囲である。ある実施形態において、式D³の鎖に対する、式Aの鎖の比率は、1:2から2:1の範囲である。

20

【0272】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、少なくとも0.1%の鎖D³を含有し、yおよびy'の合計は、2超である。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、少なくとも0.5%および20%の鎖D³を含有し、yおよびy'の合計は、2超である。

30

【0273】

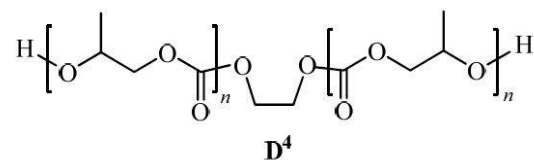
ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプAの鎖とともに、タイプDの鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプAおよびBの鎖の混合物とともに、タイプDの鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプCの鎖とともに、タイプDの鎖を含み、任意に、タイプAの鎖またはタイプAおよびBの混合物も含有する。

【0274】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプD¹の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、エチレングリコールの結合形態であり(例えば、Zが-OCH₂CH₂O-である)、得られるポリマー鎖は、式D⁴を有し、

40

【化12】



式中、各nは、独立して、上で定義されるとおりである。

【0275】

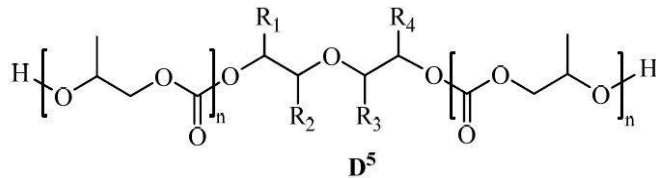
50

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 A、B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 D⁴ を有する鎖を有する。

【0276】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプ D¹ の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、(異性体の混合物であり得る)ジプロピレングリコールの結合形態であり、得られるポリマー鎖は、式 D⁵ を有し、

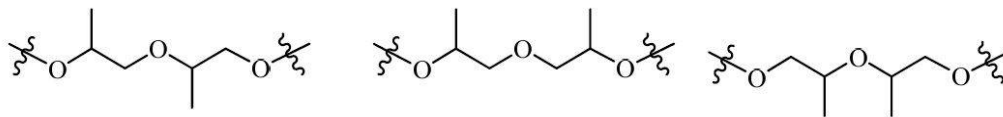
【化13】



10

式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりであり、R₁ および R₂ のうちの一方は、メチルであり、他方は、水素であり、R₃ および R₄ のうちの一方は、メチルであり、他方は、水素である(例えば、式 D¹ 中の Z は、以下の構造のうちの 1 つを有する)。

【化14】



20

【0277】

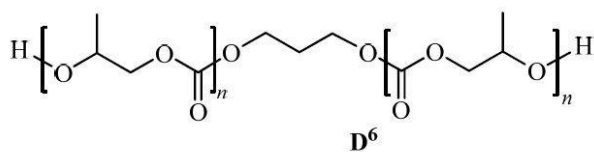
ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 A、B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 D⁵ を有する鎖を有する。

【0278】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプ D¹ の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、1,3-プロパンジオールの結合形態であり(例えば、Z が -OCH₂CH₂CH₂O- である)、得られるポリマー鎖は、式 D⁶ を有し、

30

【化15】



式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりである。

【0279】

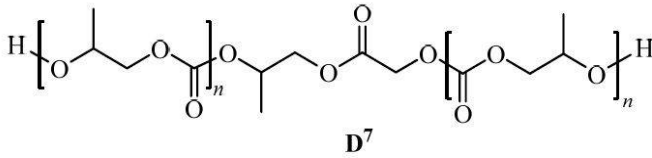
ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 A、B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 D⁶ を有する鎖を有する。

40

【0280】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプ D³ の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、グリコール酸の結合形態であり、得られるポリマー鎖は、式 D⁷ を有する。

【化 1 6】



【 0 2 8 1】

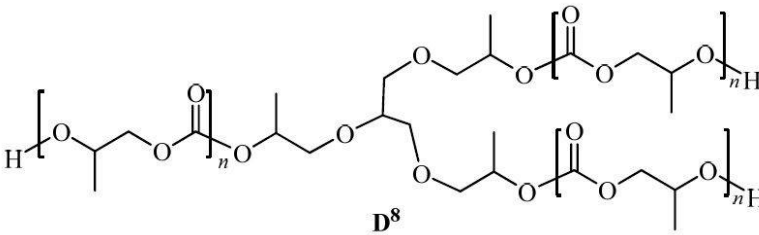
ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 A、B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 D⁷ を有する鎖を有する。

10

【 0 2 8 2】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプ D³ の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、プロポキシ化グリセロールの結合形態であり、得られるポリマー鎖は、式 D⁸ を有し、

【化 1 7】



20

式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりである。

【 0 2 8 3】

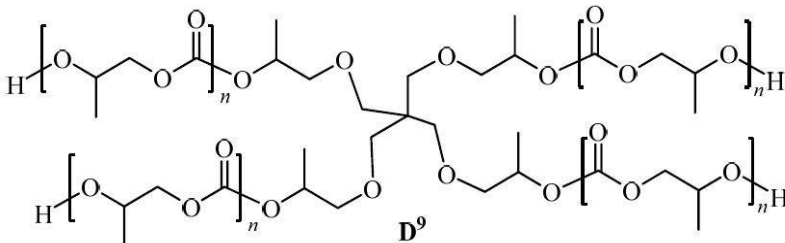
ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 A、B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 D⁹ を有する鎖を有する。

【 0 2 8 4】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプ D³ の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、プロポキシ化ペンタエリトリールの結合形態であり、得られるポリマー鎖は、式 D⁹ を有し、

30

【化 1 8】



40

式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりである。

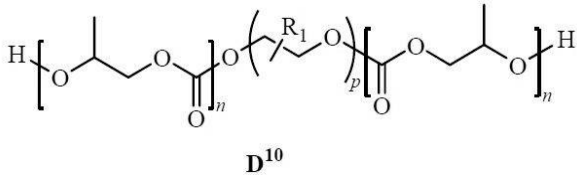
【 0 2 8 5】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 A、B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 D⁹ を有する鎖を有する。

【 0 2 8 6】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプ D³ の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、ポリエチレングリコールまたはポリプロピレングリコールの結合形態であり、得られるポリマー鎖は、式 D¹⁰ を有し、

【化 19】



式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりであり、 p は、2 から 200 を含めた整数であり、 R^1 は、任意に存在し、存在する場合、メチルである。

【0287】

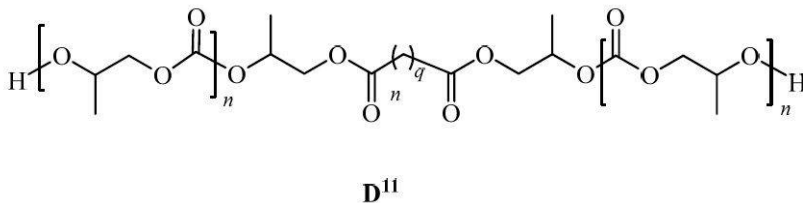
ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 A、B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 D^{10} を有する鎖を有する。

10

【0288】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプ D^3 の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、任意に非置換された二酸の結合形態である。ある実施形態において、二酸は、直鎖飽和二酸であり、得られるポリマー鎖は、式 D^{11} を有し、

【化 20】



式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりであり、 q は、0 から 32 を含めた整数である。

20

【0289】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 A、B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 D^{11} を有する鎖を有する。

30

【0290】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、埋め込まれた鎖移動部分の同一性によって相互から区別される、タイプ D の 2 つ以上の種類の鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、1 つ以上の追加の異なる鎖 D タイプとともに、タイプ D^4 のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、1 つ以上の追加の異なる鎖 D タイプとともに、タイプ D^5 のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、1 つ以上の追加の異なる鎖 D タイプとともに、タイプ D^6 のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、1 つ以上の追加の異なる鎖 D タイプとともに、タイプ D^7 のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、1 つ以上の追加の異なる鎖 D タイプとともに、タイプ D^8 のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、1 つ以上の追加の異なる鎖 D タイプとともに、タイプ D^9 のポリマー鎖を含む。

40

【0291】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプ D の鎖とともに、タイプ C のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプ D^4 の鎖とともに、タイプ C のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプ

50

D⁵の鎖とともに、タイプCのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプD⁶の鎖とともに、タイプCのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプD⁷の鎖とともに、タイプCのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプD⁸の鎖とともに、タイプCのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプD⁹の鎖とともに、タイプCのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプCおよびDの鎖とともに、タイプAのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプCおよびDの鎖とともに、タイプAおよびBのポリマー鎖を含む。

10

【0292】

ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、鎖タイプAまたはAおよびBとともに、タイプCの鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、より少ない量の鎖タイプAまたはAおよびBとともに、主に、タイプCの鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、より少ない量のタイプAの鎖とともに、大部分(例えば、>50%、>60%、>70%、>80%、または>90%)のタイプCの鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、より少ない量のタイプAおよびBの鎖の混合物とともに、大部分(例えば、>50%、>60%、>70%、>80%、または>90%)のタイプCの鎖を含む。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、より少ない量のタイプAおよびBの鎖の混合物とともに、大部分(例えば、>50%、>60%、>70%、>80%、または>90%)のタイプCおよびDの鎖を含む。

20

【0293】

一部の実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、構造CおよびD、またはCおよびDの混合物の鎖から選択される、約30から80%のポリマー鎖、ならびに構造A、B、またはAおよびBの混合物から選択される、20から70%の鎖を含む。

【0294】

ある実施形態において、PPCは、任意の比率の1つ以上の鎖タイプCおよび/またはDとともに、等しい比率のA²およびB²(例えば、A²鎖とB²鎖との間で1:1の比率)を有する。ある実施形態において、PPCは、構造A²、B²、C、およびD⁴を有する、ほぼ等しい比率の4つの鎖タイプを含有する。ある実施形態において、PPCは、任意の比率の鎖タイプCとともに、ほぼ等しい比率のA²、B²、およびD⁴(例えば、A²鎖と、B²鎖と、D⁴鎖との間でおよそ1:1:1の比率)を有する。ある実施形態において、PPCは、およそ10から90%の鎖タイプA²、B²、C、およびD⁴の各々を含有する。

30

【0295】

ある実施形態において、PPCは、任意の比率の鎖タイプCとともに、ほぼ等しい比率のA²、B²、およびD⁵(例えば、A²鎖と、B²鎖と、D⁵鎖との間でおよそ1:1:1の比率)を有する。ある実施形態において、PPCは、およそ10から90%の鎖タイプA²、B²、C、およびD⁵の各々を含有する。

40

【0296】

ある実施形態において、PPCは、任意の比率の鎖タイプCとともに、ほぼ等しい比率のA²、B²、およびD⁶(例えば、A²鎖と、B²鎖と、D⁶鎖との間でおよそ1:1:1の比率)を有する。ある実施形態において、PPCは、およそ10から90%の鎖タイプA²、B²、C、およびD⁶の各々を含有する。

【0297】

ある実施形態において、PPCは、任意の比率の鎖タイプCとともに、ほぼ等しい比率のA²、B²、およびD⁷(例えば、A²鎖と、B²鎖と、D⁷鎖との間でおよそ1:1

50

: 1の比率)を有する。ある実施形態において、PPCは、およそ10から90%の鎖タイプA²、B²、C、およびD⁷の各々を含有する。

【0298】

ある実施形態において、PPCは、任意の比率の鎖タイプCとともに、ほぼ等しい比率のA²、B²、およびD⁸(例えば、A²鎖と、B²鎖と、D⁸鎖との間でおよそ1:1:1の比率)を有する。ある実施形態において、PPCは、およそ10から90%の鎖タイプA²、B²、C、およびD⁸の各々を含有する。

【0299】

ある実施形態において、PPCは、任意の比率の鎖タイプCとともに、ほぼ等しい比率のA²、B²、およびD⁹(例えば、A²鎖と、B²鎖と、D⁹鎖との間でおよそ1:1:1の比率)を有する。ある実施形態において、PPCは、およそ10から90%の鎖タイプA²、B²、C、およびD⁹の各々を含有する。

10

【0300】

ある実施形態において、PPCは、任意の比率の鎖タイプCとともに、ほぼ等しい比率のA²、B²、およびD¹⁰(例えば、A²鎖と、B²鎖と、D¹⁰鎖との間でおよそ1:1:1の比率)を有する。ある実施形態において、PPCは、およそ10から90%の鎖タイプA²、B²、C、およびD¹⁰の各々を含有する。

【0301】

ある実施形態において、PPCは、任意の比率の鎖タイプCとともに、ほぼ等しい比率のA²、B²、およびD¹¹(例えば、A²鎖と、B²鎖と、D¹¹鎖との間でおよそ1:1:1の比率)を有する。ある実施形態において、PPCは、およそ10から90%の鎖タイプA²、B²、C、およびD¹¹の各々を含有する。

20

【0302】

ある実施形態において、構造的に精密なPPCが、2つ以上の鎖タイプ(例えば、構造AからD¹¹のいずれか)を含む場合、各出現におけるnの値は、ほぼ同じである。

【0303】

ある実施形態において、上で説明される構造AからD¹¹のいずれも、修飾することができる。ある実施形態において、これは、末端ヒドロキシル基(複数を含む)において、後重合化学反応を実施することによって行うことができる。ある実施形態において、構造的に精密なポリ(プロピレンカーボネート)は、タイプAからD¹¹の鎖を含有してもよく、末端基は、エステル、エーテル、カルバメート、スルホン酸塩、またはカーボネートである。ある実施形態において、これらの誘導体は、酢酸塩、トリフルオロ酢酸、安息香酸塩、またはペンタフルオロ安息香酸塩といった基を提供するように、アシル化剤との反応によって形成されてもよい。一部の実施形態において、ヒドロキシル基は、カルバメートを形成するようにイソシアン酸塩と、シリルエーテルを形成するようにハロゲン化シリルもしくはスルホン酸シリルと、エーテルを形成するようにハロゲン化アルキルもしくはスルホン酸アルキルと、またはスルホン酸塩を形成するようにハロゲン化スルホニルもしくは無水物と、反応されてもよい。

30

【0304】

実施例A1からA4は、構造的に精密なPPCを作製する方法を説明する。異なる鎖移動剤を使用すること、および反応物中に存在する水の量を制御することによって、試料中の鎖タイプの同一性および相対比率が変更される。

40

【0305】

実施例A1: B²およびCの鎖を含むPPCの合成。

1リットルのParr反応器を、33ppmの水、123mgのラセミン, N'-ビス(3,5-ジ-tert-ブチルサリチリデン)-1,2-シクロヘキサジアミノコバルト(III)トリフルオロ酢酸(salicyCoTFA)触媒、および112mgのビス(トリフェニルホスフィン)イミニウムトリフルオロ酢酸(PPN-TFA)共触媒を含有する、200グラムの酸化プロピレンで充填した。温度を35に維持しつつ、反応器を封止し、CO₂で100psiまで加圧し、250rpmで撹拌した。23時間後、

50

200 gのアセトン中の2.1等量のメタンスルホン酸(MSA)で、重合を停止した。反応混合物を蒸留して、未反応の酸化プロピレンを除去し、次いで、試料を50/50 MeOH/H₂O中で沈殿させて、固体ポリマーを単離した。回収されたポリマーを真空オープン内で乾燥させ、次いで、アセトンの中へ20重量%で再溶解し、2回目の沈殿を行った。回収されたポリマーを、75の真空オープンで8時間乾燥させた。GPC分析は、実施例1から生じるPPC試料が、二峰性の分子量分布を有し、それぞれタイプCおよびB²の鎖に対応する、230.8 kg/molおよび110 kg/molのM_wを有する鎖のほぼ等しい集団を有するというを明らかにした。

【0306】

実施例1a：A²、B²、およびCの鎖を含むPPCの合成。

本実施例のPPCは、PPN-TFAの代わりに、104 mgのビス(トリフェニルホスフィン)イミニウムクロリド(PPN-Cl)を用いたことを除き、実施例1と同一の条件下で産生される。タイプA²およびB²の鎖の存在および相対存在量は、塩素およびフッ素を検出するための分析方法によって検出することができる。好適な方法は、当該技術分野において既知であり、とりわけ、質量分光法およびフッ素NMRが挙げられる。

【0307】

実施例2：B²、C、およびD⁵の鎖を含むPPCの合成。

1リットルのParr反応器を、33 ppmの水、58 mgのジプロピレングリコール、123 mgのsalicyCoTFA触媒、および112 mgのPPN-TFA共触媒を含有する、200グラムの酸化プロピレンで充填した。温度を35に維持しつつ、反応器を封止し、CO₂で100 psiまで加圧し、250 rpmで撹拌した。23時間後、200 gのアセトン中の2.1等量のメタンスルホン酸(MSA)で、重合を停止した。反応混合物を蒸留して、未反応の酸化プロピレンを除去し、次いで、試料を50/50 MeOH/H₂O中で沈殿させて、固体ポリマーを単離した。回収されたポリマーを真空オープン内で乾燥させ、次いで、アセトン中へ20重量%で再溶解し、2回目の沈殿を行った。回収されたポリマーを、75の真空オープンで8時間乾燥させた。

【0308】

実施例3：B²、C、およびD⁸の鎖を含むPPCの合成。

この材料は、ジプロピレングリコールの代わりに、76 mgのグリセロールプロポキシレートを用いたことを除き、実施例2において説明されるものと同一の条件下で産生された。

【0309】

実施例4：B²、C、およびD⁹の鎖を含むPPCの合成。

この材料は、ジプロピレングリコールの代わりに、92 mgのペンタエリトリールプロポキシレートを用いたことを除き、実施例2において説明されるものと同一の条件下で産生された。

【0310】

実施例2から4のポリマーにおいて、ゲル浸透クロマトグラフィ(GPC)を実施した。実施例2から得られるポリマーは、二峰性の分子量分布を有し、タイプB²の鎖の混合物に対応する、およそ60 kg/molのM_wを有するより小さな鎖集団とともに、およそ120 kg/mol(タイプD⁵およびCの鎖の混合物)のM_wを有する鎖を主に含有する。実施例2からのポリマーに関して、M_nは、約92 kg/molであり、M_wは、約118 kg/molであり、PDIは、約1.29であった。実施例3および4からの試料は、各々、GPCにおいて、特徴的な三峰性の分子量分布を示す。3つの構成要素は、タイプB²(低分子量集団)の鎖、タイプCの鎖を含有する中間集団、およびタイプD⁸(実施例3)またはD⁹(実施例4)の鎖に対応する高M_w集団に対応する。実施例3からのポリマーに関して、M_nは、約90 kg/molであり、M_wは、約127 kg/molであり、PDIは、約1.42であった。実施例4からのポリマーに関して、M_nは、約115 kg/molであり、M_wは、約185 kg/molであり、PDIは、約1.61であった。

10

20

30

40

50

【0311】

これらの鎖タイプの比率は、様々なメルトフローインデックス(MFI)を有するPPC組成物を提供するように、前述の実施例において開示される方法を使用して、または異なる鎖タイプを有する試料の物理的ブレンドによって、操作することができる。ある用途において、より高いMFIを有することは、本発明のプラスチック物品を作製するための射出成形および押出動作に対して有利であり得る。実施例2のPPCは、170で2.16kgで測定される時、2.56g/10分のMFIを有することが見出された。同じ条件下で、実施例3のPPCは、2.35g/10分のMFIを有することが見出された一方で、実施例4のそれは、0.79g/10分であることが見出された。当業者は、これらの傾向を使用して、様々な溶融流れ特性を有するPPC組成物を調合することができることが理解されよう。

10

【0312】

PPCは、170で押出機を通過させ、引張試験片を作製するように射出成形され、種々の厚さのフィルムに押出された。商標名QPACの下で商業的に入手可能な先行技術PPCを処理する試行が行われたが、先行技術の材料は、これらの条件下で処理することができなかつたか、または得られたフィルムおよびそれを有する引張試験片は、極度に軟性であり、かつ本発明のPPCの試料によって呈される構造的完全性に欠乏したかのいずれかであった。いかなる理論によっても制約されることなく、またはそれにより特許請求される本発明の範囲を限定することなく、これは、これらの温度での押出プロセスの間の商業的なPPCの熱分解による可能性があると考えられる。

20

【0313】

付録B

本発明のある実施形態における使用に好適なPEC組成物の説明。

ある実施形態において、PECは、それが、高いパーセンテージのカーボネート結合を有することを特徴とする。一部の実施形態において、PPCは、それが、狭い多分散性指数を有することを特徴とする。ある実施形態において、PPCは、それが、非常に低いレベルの環状カーボネートを含有することを特徴とする。

【0314】

構造的に精密なポリ(エチレンカーボネート)が高いパーセンテージのカーボネート結合によって特徴付けられる、それらの実施形態において、ポリマーは、平均で、カーボネート結合を介して接続される約90%超の隣接するモノマー単位、および約10%未満のエーテル結合を有する。ある実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PECにおける約95%超の隣接するモノマー単位は、カーボネート結合を介して接続される。一部の実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PECにおける約97%超の隣接するモノマー単位は、カーボネート結合を介して接続される。一部の実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PECにおける約99%超の隣接するモノマー単位は、カーボネート結合を介して接続される。一部の実施形態において、平均で、提供されるポリマーブレンドおよびフィルムにおいて、PECにおける本質的に全ての隣接するモノマー単位は、カーボネート結合を介して接続される。ある実施形態において、ポリマーブレンドおよびフィルムは、カーボネート鎖から別個のプロセスにおいて形成されるポリエーテル部分を含んでもよく、かかる場合、ポリエーテル部分のエーテル結合は、典型的に、CO₂および酸化プロピレンの不完全な共重合から生じる、上で説明されるエーテル結合とは異なることが理解されるものとする。

30

40

【0315】

ポリ(エチレンカーボネート)が狭い多分散性指数(PDI)によって特徴付けられる、それらの実施形態において、PECは、約2未満のPDIを有する。ある実施形態において、PECは、約1.8未満のPDIを有する。一部の実施形態において、PECは、約1.5未満のPDIを有する。一部の実施形態において、PECは、約1.4未満、約1.2未満、または約1.1未満のPDIを有する。ある実施形態において、PECは、

50

約 1.0 ~ 約 1.2 の PDI を有する。

【0316】

ポリ(エチレンカーボネート)が低い環状カーボネート含有量によって特徴付けられる、それらの実施形態において、PECは、約5%未満の環状カーボネート含有量を有する。ある実施形態において、PECは、5%未満のプロピレンカーボネートを含有する。一部の実施形態において、PECは、3%未満のプロピレンカーボネートを含有する。一部の実施形態において、PECは、1%未満のプロピレンカーボネートを含有する。ある実施形態において、PECは、プロピレンカーボネートを本質的に含有しない。

【0317】

一部の実施形態において、構造的に精密なポリ(エチレンカーボネート)は、それが、高いパーセンテージのカーボネート結合、狭い多分散性指数、および低い環状カーボネート含有量から成る群より選択される、2つ以上の特性の組み合わせを有することを特徴とする。一部の実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、それが、狭い多分散性指数および高いパーセンテージのカーボネート結合の組み合わせを有することを特徴とする。一部の実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、それが、高いパーセンテージのカーボネート結合および低い環状含有量の組み合わせを有することを特徴とする。一部の実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、それが、狭い多分散性指数および低い環状含有量の組み合わせを有することを特徴とする。

10

【0318】

ポリ(エチレンカーボネート)は、ポリマーブレンドおよびポリマーフィルムにおいて、様々な分子量を有してもよい。特定の用途に関して、性能および処理特性の最適な組み合わせを得るために、より高いまたはより低い分子量の材料を使用することが望ましい場合がある。かかる選択プロセスは、当業者には公知である。ポリマーの分子量は、分子量数(M_n)によって表すことができる。本明細書において説明される高分子量PECは、一般的に、約 5×10^4 g/mol超の M_n を有する。本明細書において説明される低分子量PECは、約 1×10^3 ~ 約 5×10^4 g/molの M_n を有する。

20

【0319】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、比較的高い M_n を有する熱可塑性物質である。ある実施形態において、熱可塑性ポリ(エチレンカーボネート)は、約 5×10^4 g/molを上回る M_n を有する。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、約 1×10^5 g/molを上回る M_n を有する。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、約 5×10^4 g/mol ~ 約 2×10^7 g/molの M_n を有する。

30

【0320】

ある実施形態において、ポリマーブレンドおよびフィルムは、約40,000 ~ 約400,000 g/molの分子量を有する、ポリ(エチレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドおよびフィルムは、約50,000 ~ 約350,000 g/molの分子量を有する、ポリ(エチレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、ポリマーブレンドおよびフィルムは、約100,000 ~ 約300,000 g/molの分子量を有する、ポリ(エチレンカーボネート)を含む。ある実施形態において、 M_n は、約150,000から約250,000 g/molの範囲内である。一部の実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、約160,000 ~ 約240,000 g/molの M_n を有する。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、約180,000 ~ 約220,000 g/molの M_n を有する。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、約180,000 g/molの M_n を有する。

40

【0321】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、以下の特性の組み合わせを有する：約60,000から約400,000 g/molの範囲内の M_n 、95%を上回るカーボネート結合含有量、約1.5未満の多分散性指数、および約5%を下回る環状カーボネート含有量。

50

【0322】

一部の実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、以下の特性の組み合わせを有する：約60,000から約100,000 g/molの範囲内の M_n 、95%を上回るカーボネート結合含有量、約1.5未満の多分散性指数、および約5%を下回る環状カーボネート含有量。

【0323】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、以下の特性の組み合わせを有する：約80,000 g/molの M_n 、98%を上回るカーボネート結合含有量、約1.2未満の多分散性指数、および約2%を下回る環状カーボネート含有量。

【0324】

一部の実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、以下の特性の組み合わせを有する：約120,000から約250,000 g/molの範囲内の M_n 、95%を上回るカーボネート結合含有量、約1.5未満の多分散性指数、および約5%を下回る環状カーボネート含有量。

【0325】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、以下の特性の組み合わせを有する：約180,000 g/molの M_n 、98%を上回るカーボネート結合含有量、約1.2未満の多分散性指数、および約2%を下回る環状カーボネート含有量。

【0326】

ある実施形態において、PECは、ブレンドにおける各PEC組成物が、異なる平均分子量を有することを特徴とする、2つ以上のPEC組成物のブレンドを含む。ある実施形態において、ポリカーボネート構成要素は、約100,000 g/molを下回る M_n を有するより低い分子量PECとの、約150,000~約400,000 g/molの M_n を有する高分子量PECのブレンドを含む。ある実施形態において、ポリカーボネート構成要素は、約30,000 g/mol~約80,000 g/molの M_n を有するより低い分子量PECとの、約150,000~約250,000 g/molの M_n を有する高分子量PECのブレンドを含む。ある実施形態において、かかるブレンドの各構成要素は、狭い多分散性を有する。ある実施形態において、ブレンドの高分子量および低分子量構成要素のPDIは、独立して測定される時、各々、1.2未満である。ある実施形態において、かかるブレンドは、低および高分子量を有するPECポリマーの個別の試料を混合することによって産生される。

【0327】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、40 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、41 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、42 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、43 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、44 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、45 を上回るガラス転移温度(T_g)を有する。

【0328】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、亜鉛含有触媒以外の触媒を使用して形成される。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、検出可能な亜鉛残基を含有しない。

【0329】

一部の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートは、遷移金属触媒の存在下で、エポキシドおよび二酸化炭素の共重合によって得られる。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、金属サレン触媒を使用して形成される。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、コバルトサレン触媒を使用して形成される。好適な触媒および方法としては、米国特許第7,304,172号、および公開されたPCT出願

10

20

30

40

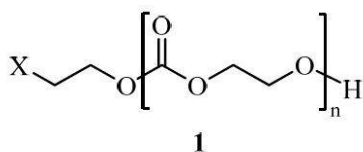
50

第 WO / 2010 / 022388 A 2 号において説明されるものが挙げられ、これらの各々の内容全体は、参照することによって、本明細書に組み込まれる。

【0330】

一部の実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、式1によって表される構造を有するポリマー鎖を含み、

【化21】



10

式中、Xは、エポキシドを開環することができる任意の求核剤の結合形態に対応する部分であり、nは、約10から約40,000の整数である。ある実施形態において、構造1におけるXは、ハロゲン化物、アジド、またはカルボン酸塩、スルホン酸塩、フェノール、およびアルコキシドの群から成る任意に置換された基から成る群より選択される。一部の実施形態において、nは、約50から約3,000である。

【0331】

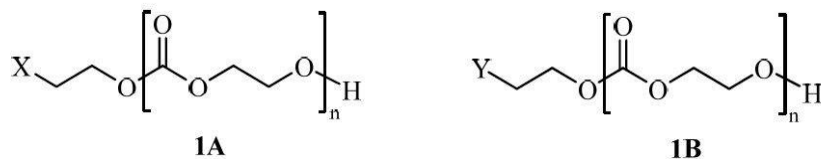
ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)ポリマーは、2つ以上の異なるポリマー鎖タイプの混合物として存在し、異なる鎖タイプは、2つ以上の異なる鎖末端基の存在、および/またはポリマー鎖内に埋め込まれる小分子ポリマー開始分子の存在、非存在、もしくは相違によって、見分けられる。

20

【0332】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、それが、2つのポリマー鎖タイプ1Aおよび1Bを含むことを特徴とし、タイプは、それらの末端基において異なる。ある実施形態において、ポリマー鎖タイプ1Aおよび1Bは、以下の式を有し、

【化22】



30

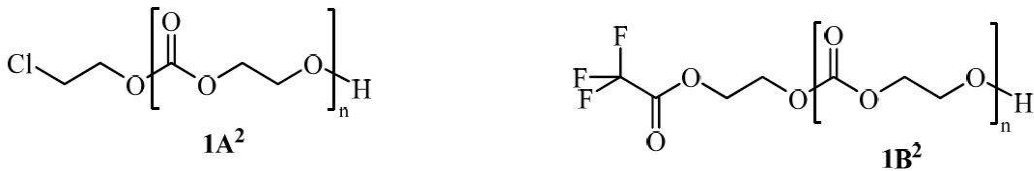
式中、nは、上で定義されるとおりであり、-Xおよび-Yは、各々、エポキシドを開環することができる求核剤を表し、-Xおよび-Yは、異なる。

【0333】

ある実施形態において、XおよびYは、独立して、ハロゲン化物、アジド、またはカルボン酸塩、スルホン酸塩、フェノール、およびアルコキシドから成る群より選択される任意に置換された基から成る群より選択される。ある実施形態において、Xは、ハロゲン化物であり、Yは、カルボン酸塩、スルホン酸塩、フェノール、およびアルコキシドから成る群より選択される任意に置換された基である。ある実施形態において、Xは、ハロゲン化物であり、Yは、カルボン酸塩である。ある実施形態において、Xは、塩化物であり、Yは、カルボン酸塩である。ある実施形態において、Xは、塩化物であり、Yは、ギ酸塩、酢酸塩、安息香酸塩、トリフルオロ酢酸、およびペンタフルオロ安息香酸塩から成る群より選択される。ある実施形態において、Xは、塩化物であり、Yは、トリフルオロ酢酸であり(構造1A²および1B²として以下に図示)、

40

【化 2 3】



式中、n は、上で定義されるとおりである。

【0334】

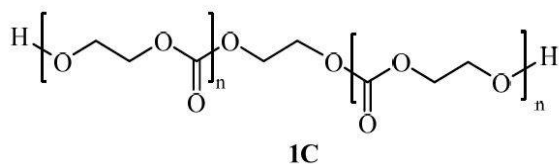
ある実施形態において、鎖タイプ 1 A と 1 B との間の比率は、約 1 : 3 から約 3 : 1 の範囲である。ある実施形態において、鎖タイプ 1 A と 1 B との間の比率は、約 1 : 2 から約 2 : 1 の範囲である。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、鎖タイプ 1 A および 1 B のほぼ等モルの混合物を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、鎖タイプ 1 A² および 1 B² のほぼ等モル混合物を含む。

10

【0335】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ 1 C の鎖を含み、

【化 2 4】



20

式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりである。

【0336】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ 1 A または 1 A および 1 B の鎖と組み合わせて、タイプ 1 C の鎖を含む。ある実施形態において、タイプ 1 A または 1 A および 1 B の鎖に対する、タイプ 1 C の鎖の比率は、(例えば、比率 1 C : 1 A または 1 C : [1 A + 1 B]) 約 0.1 : 1 から約 100 : 1 の範囲である。ある実施形態において、この比率は、約 1 : 1 ~ 約 10 : 1 である。ある実施形態において、この比率は、約 2 : 1 ~ 約 5 : 1 である。

30

【0337】

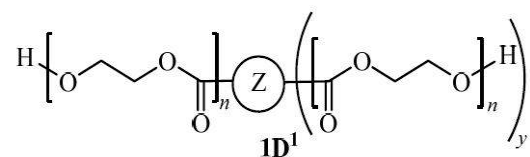
一部の実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、それらの中に埋め込まれるポリマー開始部分を有する、タイプ 1 D の鎖を含む。ある実施形態において、埋め込まれたポリマー開始部分は、ポリカーボネート鎖のほぼ中心に位置する(換言すると、その部分は、2 つ以上のポリ(エチレンカーボネート)鎖に結合され、統計的に、各鎖は、ほぼ等しい長さである)。ある実施形態において、タイプ 1 D の鎖は、埋め込まれたポリマー開始部分に結合される、2 つのポリカーボネート鎖を有する、線状ポリマー鎖である。ある実施形態において、タイプ 1 D の鎖は、埋め込まれたポリマー開始部分に結合される 3 つ以上のポリカーボネート鎖を有する、星型ポリマーである。

【0338】

ある実施形態において、タイプ 1 D の鎖は、式 1 D¹ を有し、

40

【化 2 5】



式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりであり、y は、いくつかの追加の個々のポリカーボネート鎖が、埋め込まれたポリマー開始部分に結合されるかを示す、1 から 5 の整数であり(例えば、埋め込まれたポリマー開始部分に結合されるポリ(エチレンカーボネート)鎖の総数は、2 から 6 の範囲である)、Z は、ポリマー鎖を開始するように(例

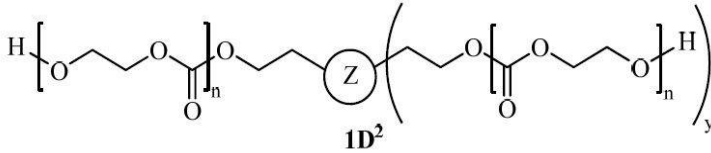
50

えば、それぞれ、酸素、窒素、硫黄、または炭素求核剤からカーボネート、カルバメート、チオカーボネート、またはエステルを形成するように)、2つ以上の部位において、二酸化炭素と反応することかできる、任意の多官能性分子である。ある実施形態において、タイプ1D¹のポリマーに対するyの値は、1である。ある実施形態において、タイプ1D¹のポリマーに対するyの値は、2である。ある実施形態において、タイプ1D¹のポリマーに対するyの値は、3である。

【0339】

一部の実施形態において、タイプ1Dの鎖は、式1D²を有し、

【化26】



10

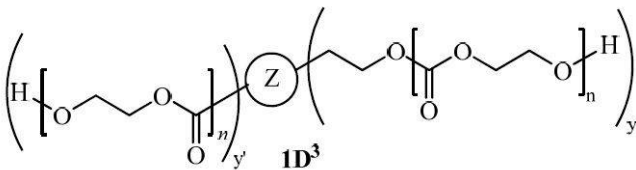
式中、各nは、独立して、上で定義されるとおりであり、yは、いくつの追加の個々のポリカーボネート鎖が、埋め込まれたポリマー開始部分に結合されるかを示す、1から5の整数であり(例えば、埋め込まれたポリマー開始部分に結合されるポリ(エチレンカーボネート)鎖の総数は、2から6の範囲である)、Zは、ポリカーボネート鎖の形成(例えば、それぞれ、エーテル、アミン、チオエーテル、または炭素・炭素結合を形成するように、それぞれ、酸素、窒素、硫黄、または炭素求核剤によって)を開始するように、エポキシドと、2つ以上の部位において、反応することができる、任意の多官能性分子である。ある実施形態において、タイプ1D²のポリマーに対するyの値は、1である。ある実施形態において、タイプ1D²のポリマーに対するyの値は、2である。ある実施形態において、タイプ1D²のポリマーに対するyの値は、3である。

20

【0340】

一部の実施形態において、タイプ1Dの鎖は、式1D³を有し、

【化27】



30

式中、各nは、独立して、上で定義されるとおりであり、yおよびy'は、各々独立して、0から6の整数であり、yおよびy'の合計は、少なくとも2であり、Zは、それぞれ、構造1D¹および1D²に関して上で説明されるように、ポリカーボネート鎖の形成を開始するように、二酸化炭素またはエポキシドと、2つ以上の部位において、反応することができる、任意の多官能性分子である。ある実施形態において、タイプ1D³のポリマーに対するy'の値は、2である。ある実施形態において、タイプ1D³のポリマーに対するyの値は、2である。ある実施形態において、タイプ1D³のポリマーに対して、yまたはy'のうちの一方の値は、2であり、他方の値は、0である。一部の実施形態において、yおよびy'の合計は、2超である。

40

【0341】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、式1Aの鎖、および式1D³の鎖を、約1:50から約50:1の比率で含有する。ある実施形態において、式1D³の鎖に対する、式1Aの鎖の比率は、1:50から1:1の範囲である。ある実施形態において、式1D³の鎖に対する、式1Aの鎖の比率は、1:10から10:1の範囲である。ある実施形態において、式1D³の鎖に対する、式1Aの鎖の比率は、1:2から2:1の範囲である。

50

【0342】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、少なくとも0.1%の鎖1D³を含有し、yおよびy'の合計は、2超である。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、少なくとも0.5%および20%の鎖1D³を含有し、yおよびy'の合計は、2超である。

【0343】

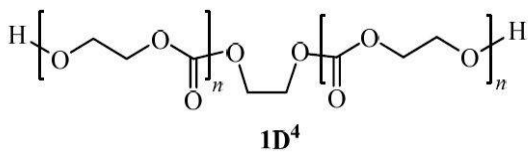
ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1Aの鎖とともに、タイプ1Dの鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1Aおよび1Bの鎖の混合物とともに、タイプ1Dの鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプCの鎖とともに、タイプDの鎖を含み、任意に、タイプ1Aの鎖またはタイプ1Aおよび1Bの混合物も含有する。

10

【0344】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D¹の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、エチレングリコールの結合形態であり(例えば、Zが-OCH₂CH₂O-である)、得られるポリマー鎖は、式1D⁴を有し、

【化28】



20

式中、各nは、独立して、上で定義されるとおりである。

【0345】

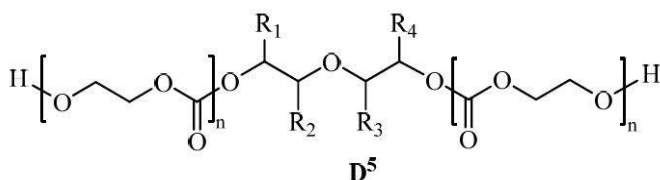
ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、そのバランスが、構造1A、1B、もしくはCの鎖、またはこれらのうちの2つ以上の混合物で構成される、およそ10から90%の構造1D⁴を有する鎖を有する。

【0346】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D¹の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、(異性体の混合物であり得る)ジプロピレングリコールの結合形態であり、得られるポリマー鎖は、式1D⁵を有し、

30

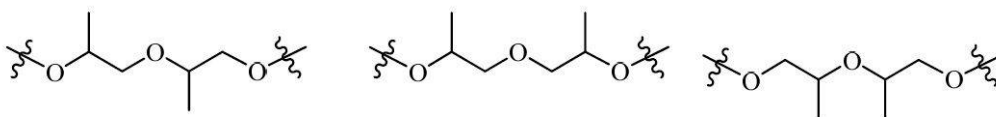
【化29】



式中、各nは、独立して、上で定義されるとおりであり、R₁およびR₂のうちの一方は、メチルであり、他方は、水素であり、R₃およびR₄のうちの一方は、メチルであり、他方は、水素である(例えば、式D¹中のZは、以下の構造のうちの1つを有する)。

40

【化30】



【0347】

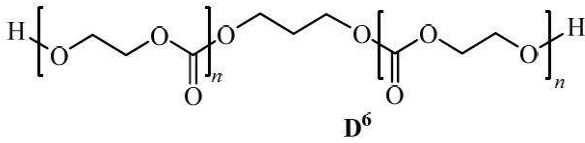
ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、そのバランスが、構造1A、1B、もしくは1Cの鎖、またはこれらのうちの2つ以上の混合物で構成される、およそ10から90%の構造1D⁵を有する鎖を有する。

50

【0348】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D¹の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、1,3プロパンジオールの結合形態であり(例えば、Zが-OCH₂CH₂CH₂O-である)、得られるポリマー鎖は、式1D⁶を有し、

【化31】



式中、各nは、独立して、上で定義されるとおりである。

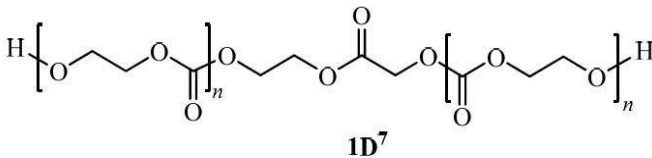
【0349】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、そのバランスが、構造1A、1B、もしくは1Cの鎖、またはこれらのうちの2つ以上の混合物で構成される、およそ10から90%の構造1D⁶を有する鎖を有する。

【0350】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D³の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、グリコール酸の結合形態であり、得られるポリマー鎖は、式1D⁷を有する。

【化32】



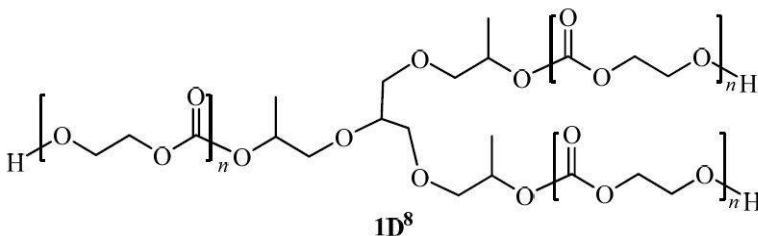
【0351】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、そのバランスが、構造1A、1B、もしくは1Cの鎖、またはこれらのうちの2つ以上の混合物で構成される、およそ10から90%の構造1D⁷を有する鎖を有する。

【0352】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D³の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、プロポキシル化グリセロールの結合形態であり、得られるポリマー鎖は、式1D⁸を有し、

【化33】



式中、各nは、独立して、上で定義されるとおりである。

【0353】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、そのバランスが、構造1A、1B、もしくは1Cの鎖、またはこれらのうちの2つ以上の混合物で構成される、およそ10から90%の構造1D⁹を有する鎖を有する。

【0354】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D³の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、プロポキシル化ペンタエリトールの結合形態であり、得

10

20

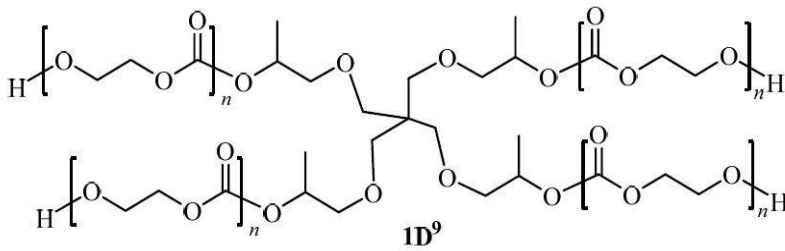
30

40

50

られるポリマー鎖は、式 1 D⁹ を有し、

【化 3 4】



10

式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりである。

【0 3 5 5】

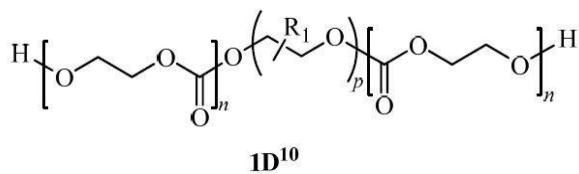
ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 1 A、1 B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 1 D⁹ を有する鎖を有する。

【0 3 5 6】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ 1 D³ の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、ポリエチレングリコールまたはポリプロピレングリコールの結合形態であり、得られるポリマー鎖は、式 1 D¹⁰ を有し、

【化 3 5】

20



式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりであり、p は、2 から 200 を含めた整数であり、R¹ は、任意に存在し、存在する場合、メチルである。

【0 3 5 7】

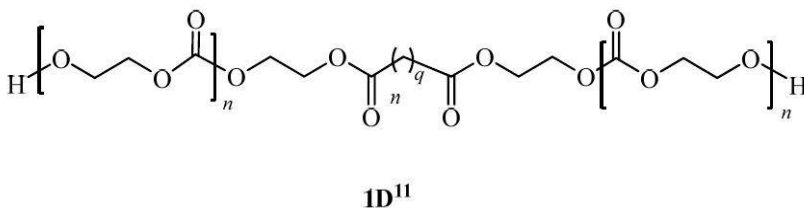
ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 1 A、1 B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 1 D¹⁰ を有する鎖を有する。

30

【0 3 5 8】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ 1 D³ の鎖を含み、埋め込まれた鎖移動部分は、任意に非置換された二酸の結合形態である。ある実施形態において、二酸は、直鎖飽和二酸であり、得られるポリマー鎖は、式 1 D¹¹ を有し、

【化 3 6】



40

式中、各 n は、独立して、上で定義されるとおりであり、q は、0 から 32 を含めた整数である。

【0 3 5 9】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、そのバランスが、構造 1 A、1 B、もしくは C の鎖、またはこれらのうちの 2 つ以上の混合物で構成される、およそ 10 から 90 % の構造 1 D¹¹ を有する鎖を有する。

50

【0360】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、埋め込まれた鎖移動部分の同一性によって相互から区別される、タイプ1Dの2つ以上の種類の鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、1つ以上の追加の異なる鎖1Dタイプとともに、タイプ1D⁴のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、1つ以上の追加の異なる鎖1Dタイプとともに、タイプ1D⁵のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、1つ以上の追加の異なる鎖1Dタイプとともに、タイプ1D⁶のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、1つ以上の追加の異なる鎖1Dタイプとともに、タイプ1D⁷のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、1つ以上の追加の異なる鎖1Dタイプとともに、タイプ1D⁸のポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、1つ以上の追加の異なる鎖1Dタイプとともに、タイプ1D⁹のポリマー鎖を含む。

10

【0361】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1Dの鎖とともに、タイプ1Cのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D⁴の鎖とともに、タイプ1Cのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D⁵の鎖とともに、タイプ1Cのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D⁶の鎖とともに、タイプ1Cのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D⁷の鎖とともに、タイプ1Cのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D⁸の鎖とともに、タイプ1Cのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1D⁹の鎖とともに、タイプ1Cのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1Cおよび1Dの鎖とともに、タイプ1Aのポリマー鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、タイプ1Cおよび1Dの鎖とともに、タイプ1Aおよび1Bのポリマー鎖を含む。

20

【0362】

ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、鎖タイプ1Aまたは1Aおよび1Bとともに、タイプ1Cの鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、より少ない量の鎖タイプ1Aまたは1Aおよび1Bとともに、主に、タイプ1Cの鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、より少ない量のタイプAの鎖とともに、大部分(例えば、>50%、>60%、>70%、>80%、または>90%)のタイプ1Cの鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、より少ない量のタイプ1Aおよび1Bの鎖の混合物とともに、大部分(例えば、>50%、>60%、>70%、>80%、または>90%)のタイプ1Cの鎖を含む。ある実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、より少ない量のタイプ1Aおよび1Bの鎖の混合物とともに、大部分(例えば、>50%、>60%、>70%、>80%、または>90%)のタイプ1Cおよび1Dの鎖を含む。

30

【0363】

一部の実施形態において、ポリ(エチレンカーボネート)は、構造1Cおよび1D、または1Cおよび1Dの混合物の鎖から選択される、約30から80%のポリマー鎖、ならびに構造1A、1B、または1Aおよび1Bの混合物から選択される、20から70%の鎖を含む。

40

【0364】

ある実施形態において、PECは、任意の比率の1つ以上の鎖タイプ1Cおよび/または1Dとともに、等しい比率の1A²および1B²(例えば、1A²鎖と1B²鎖との間で1:1の比率)を有する。ある実施形態において、PECは、構造1A²、1B²、C、およびD⁴を有する、ほぼ等しい比率の4つの鎖タイプを含有する。ある実施形態において、PECは、任意の比率の鎖タイプ1Cとともに、ほぼ等しい比率の1A²、1B²

50

、および D^4 (例えば、 $1A^2$ 鎖と、 $1B^2$ 鎖と、 $1D^4$ 鎖との間でおよそ 1 : 1 : 1 の比率) を有する。ある実施形態において、PEC は、およそ 10 から 90 % の鎖タイプ $1A^2$ 、 $1B^2$ 、 $1C$ 、および $1D^4$ の各々を含有する。

【0365】

ある実施形態において、PEC は、任意の比率の鎖タイプ $1C$ とともに、ほぼ等しい比率の $1A^2$ 、 $1B^2$ 、および $1D^5$ (例えば、 $1A^2$ 鎖と、 $1B^2$ 鎖と、 $1D^5$ 鎖との間でおよそ 1 : 1 : 1 の比率) を有する。ある実施形態において、PEC は、およそ 10 から 90 % の鎖タイプ $1A^2$ 、 $1B^2$ 、 $1C$ 、および $1D^5$ の各々を含有する。

【0366】

ある実施形態において、PEC は、任意の比率の鎖タイプ $1C$ とともに、ほぼ等しい比率の $1A^2$ 、 $1B^2$ 、および $1D^6$ (例えば、 $1A^2$ 鎖と、 $1B^2$ 鎖と、 $1D^6$ 鎖との間でおよそ 1 : 1 : 1 の比率) を有する。ある実施形態において、PEC は、およそ 10 から 90 % の鎖タイプ $1A^2$ 、 $1B^2$ 、 $1C$ 、および $1D^6$ の各々を含有する。

10

【0367】

ある実施形態において、PEC は、任意の比率の鎖タイプ C とともに、ほぼ等しい比率の $1A^2$ 、 $1B^2$ 、および $1D^7$ (例えば、 $1A^2$ 鎖と、 $1B^2$ 鎖と、 $1D^7$ 鎖との間でおよそ 1 : 1 : 1 の比率) を有する。ある実施形態において、PEC は、およそ 10 から 90 % の鎖タイプ $1A^2$ 、 $1B^2$ 、 $1C$ 、および $1D^7$ の各々を含有する。

【0368】

ある実施形態において、PEC は、任意の比率の鎖タイプ $1C$ とともに、ほぼ等しい比率の $1A^2$ 、 $1B^2$ 、および $1D^8$ (例えば、 $1A^2$ 鎖と、 $1B^2$ 鎖と、 $1D^8$ 鎖との間でおよそ 1 : 1 : 1 の比率) を有する。ある実施形態において、PEC は、およそ 10 から 90 % の鎖タイプ $1A^2$ 、 $1B^2$ 、 $1C$ 、および $1D^8$ の各々を含有する。

20

【0369】

ある実施形態において、PEC は、任意の比率の鎖タイプ C とともに、ほぼ等しい比率の $1A^2$ 、 $1B^2$ 、および $1D^9$ (例えば、 $1A^2$ 鎖と、 $1B^2$ 鎖と、 $1D^9$ 鎖との間でおよそ 1 : 1 : 1 の比率) を有する。ある実施形態において、PEC は、およそ 10 から 90 % の鎖タイプ $1A^2$ 、 $1B^2$ 、 $1C$ 、および $1D^9$ の各々を含有する。

【0370】

ある実施形態において、PEC は、任意の比率の鎖タイプ $1C$ とともに、ほぼ等しい比率の $1A^2$ 、 $1B^2$ 、および $1D^{10}$ (例えば、 $1A^2$ 鎖と、 $1B^2$ 鎖と、 $1D^{10}$ 鎖との間でおよそ 1 : 1 : 1 の比率) を有する。ある実施形態において、PEC は、およそ 10 から 90 % の鎖タイプ $1A^2$ 、 $1B^2$ 、 $1C$ 、および $1D^{10}$ の各々を含有する。

30

【0371】

ある実施形態において、PEC は、任意の比率の鎖タイプ C とともに、ほぼ等しい比率の $1A^2$ 、 $1B^2$ 、および $1D^{11}$ (例えば、 $1A^2$ 鎖と、 $1B^2$ 鎖と、 $1D^{11}$ 鎖との間でおよそ 1 : 1 : 1 の比率) を有する。ある実施形態において、PEC は、およそ 10 から 90 % の鎖タイプ $1A^2$ 、 $1B^2$ 、 $1C$ 、および $1D^{11}$ の各々を含有する。

【0372】

ある実施形態において、PEC が、2 つ以上の鎖タイプ (例えば、構造 $1A$ から $1D^1$ のいずれか) を含む場合、各出現における n の値は、ほぼ同じである。

40

【0373】

ある実施形態において、上で説明される構造 $1A$ から $1D^{11}$ のいずれも、修飾することができる。ある実施形態において、これは、末端ヒドロキシル基 (複数を含む) において、後重合化学反応を実施することによって行うことができる。ある実施形態において、ポリ (エチレンカーボネート) は、タイプ $1A$ から $1D^{11}$ の鎖を含有してもよく、末端基は、エステル、エーテル、カルバメート、スルホン酸塩、またはカーボネートである。ある実施形態において、これらの誘導体は、酢酸塩、トリフルオロ酢酸、安息香酸塩、またはペンタフルオロ安息香酸塩といった基を提供するように、アシル化剤との反応によって形成されてもよい。一部の実施形態において、ヒドロキシル基は、カルバメートを形成

50

R^b 、 R^c 、および R^d の各々は、独立して、水素、ハロゲン、または、 C_{1-12} 脂肪族；独立して、窒素、酸素、および硫黄から成る群より選択される 1～4 個のヘテロ原子を有する、 C_{1-12} ヘテロ脂肪族；3 から 14 員の炭素環；6 から 14 員のアリール；独立して窒素、酸素、もしくは硫黄より選択される 1～4 個のヘテロ原子を有する、5 から 14 員のヘテロアリール；ならびに独立して、窒素、酸素、および硫黄から成る群より選択される 1～3 個のヘテロ原子を有する、3 から 12 員の複素環から成る群より選択される、任意に置換された基であり、

(R^a および R^c)、(R^c および R^d)、ならびに (R^a および R^b) のうちのいずれも、介在する原子と一緒に、3 から 14 員の炭素環；および独立して、窒素、酸素、および硫黄から成る群より選択される 1～3 個のヘテロ原子を有する、3 から 12 員の複素環から成る群より選択される、1つ以上の任意に置換された環を形成することができ、

E は、エポキシドを開環することができる任意の基であり、

G は、水素、 C_{1-20} アシル基、シリル基、任意に置換された C_{1-20} 脂肪族基、任意に置換された 6 から 14 員のアリール基、カルバモイル基、およびヒドロキシル保護基から成る群より選択され、

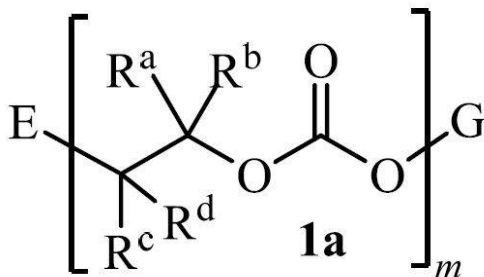
j は、約 50 から約 15,000 の整数であり、

k は、約 0 から約 2,500 の整数であり、

m は、j および k の合計であり、m は、約 50 から約 17,500 の整数である。

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式 1 a の構造を有するポリカーボネートを

【化 38】

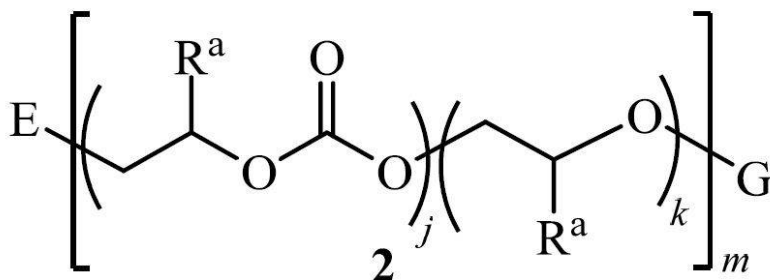


式中、E、G、 R^a 、 R^b 、 R^c 、および R^d は、上で定義されるとおりであり、m は、約 100～約 17,500 の整数である。

【0377】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式 2 の構造を有するポリカーボネートを

【化 39】



式中、E、G、 R^a 、j、k、および m は、上で定義されるとおりである。

【0378】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式 2 の構造を有するポリカーボネートを

含み、式中、 R^a は、-H、メチル、エチル、プロピル、ブチル、高級飽和脂肪族、クロ

ロメチル、トリフルオロメチル、ペンタフルオロエチル、高級フルオロアルキル、ビニル、アリル、フェニル、ベンジル、高級不飽和脂肪族、および CH_2OR^2 から成る群より選択され、 R^2 は、上で定義されるとおりである。ある実施形態において、ポリカーボネートは、これらの R^a 基のうちのいずれか 2 つ以上を組み込むモノマー単位を含む、ランダム、テーパー型、またはブロックコポリマーの一部である。

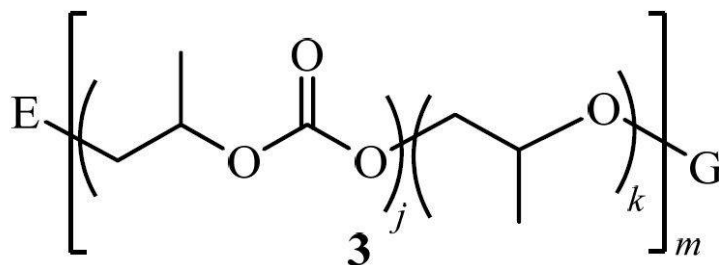
【0379】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式 2 の構造を有するポリカーボネートを含み、式中、 R^a は、 $-\text{H}$ 、メチル、エチル、プロピル、ブチル、 $\text{C}_5 - 30$ アルキル、クロロメチル、トリフルオロメチル、ペンタフルオロエチル、ビニル、アリル、フェニル、ベンジル、 CH_2OAc 、 $\text{CH}_2\text{OC}(\text{O})\text{CF}_3$ 、 $\text{CH}_2\text{OC}(\text{O})\text{Et}$ 、 CH_2O 10 Bz 、 CH_2OMe 、 CH_2OEt 、 CH_2OPr 、 CH_2OBu 、 CH_2OPh 、 CH_2OBn 、 $\text{CH}_2\text{Oアリル}$ 、および CH_2OCF_3 から成る群より選択される。ある実施形態において、ポリカーボネートは、これらの R^a 基のうちのいずれか 2 つ以上を組み込むモノマー単位を含む、ランダム、テーパー型、またはブロックコポリマーの一部である。

【0380】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式 3 の構造を有するポリカーボネートを含み、

【化 40】

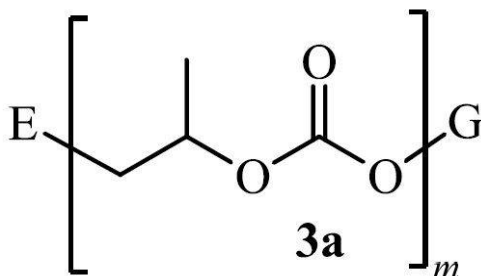


式中、 E 、 G 、 j 、 k 、および m は、上で定義されるとおりである。

【0381】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式 3 a の構造を有するポリカーボネート 30 を含み、

【化 41】

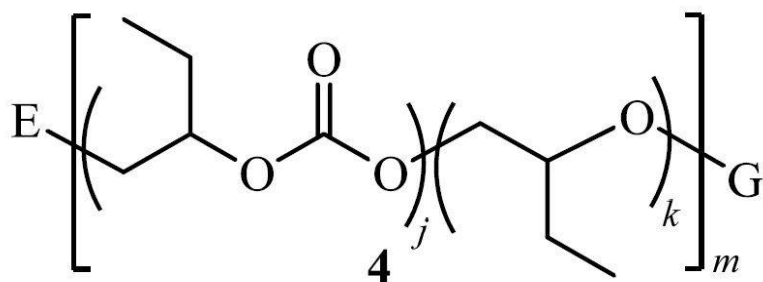


式中、 E および G は、上で定義されるとおりであり、 m は、約 100 ~ 約 17,500 の 40 整数である。

【0382】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式 4 の構造を有するポリカーボネートを含み、

【化 4 2】



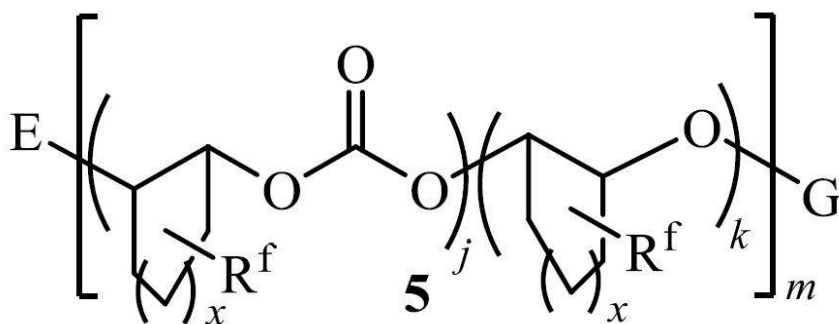
10

式中、E、G、j、k、およびmは、上で定義されるとおりである。

【0383】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式5の構造を有するポリカーボネートを
 含み、

【化 4 3】



20

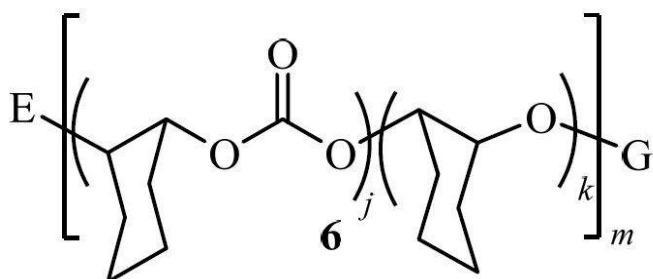
式中、E、G、R^a、j、k、およびmは、上で定義されるとおりであり、各R^fは、独立して、任意に置換されたC₁₋₁₀脂肪族基であり、xは、0~5を含めた整数である。

【0384】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式6の構造を有するポリカーボネートを
 含み、

30

【化 4 4】



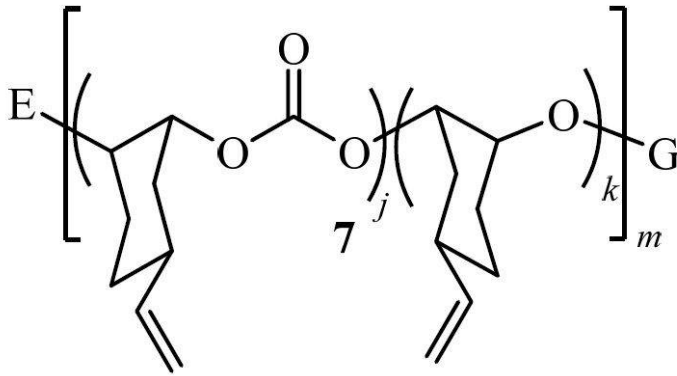
40

式中、E、G、j、k、およびmは、上で定義されるとおりである。

【0385】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式7の構造を有するポリカーボネートを
 含み、

【化45】



10

式中、E、G、j、k、およびmは、上で定義されるとおりである。

【0386】

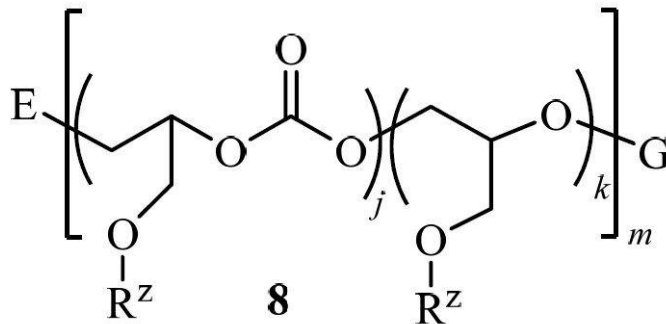
一部の実施形態において、 R^a は、 $-L-OR^z$ である。一部の実施形態において、Lは、二価 C_{1-8} 飽和もしくは不飽和、直鎖もしくは分岐、炭化水素鎖である。一部の実施形態において、Lの1つ以上のメチレン単位は、任意に、かつ独立して、 $-NR-$ 、 $-N(R)C(O)-$ 、 $-C(O)N(R)-$ 、 $-N(R)SO_2-$ 、 $-SO_2N(R)-$ 、 $-O-$ 、 $-C(O)-$ 、 $-OC(O)-$ 、 $-C(O)O-$ 、 $-S-$ 、 $-SO-$ 、 $-SO_2-$ 、 $-C(=S)-$ 、または $-C(=NR)-$ によって置き換えられる。一部の実施形態において、Lは、二価 C_{1-8} 飽和炭化水素鎖であり、Lの1または2つのメチレン単位は、任意に、かつ独立して、 $-O-$ によって置き換えられる。ある実施形態において、Lは、 $-CH_2-$ である。

20

【0387】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式8の構造を有するポリカーボネートを含み、

【化46】



30

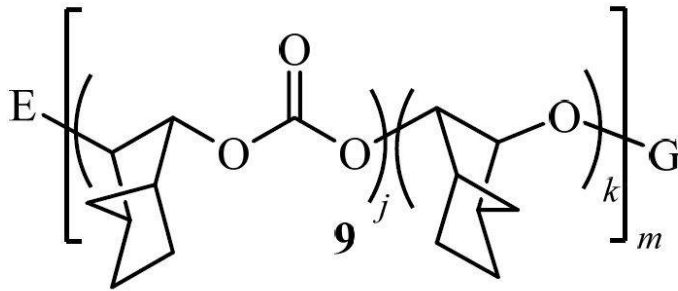
式中、 R^z 、E、G、j、k、およびmは、上で定義されるとおりである。

【0388】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式9の構造を有するポリカーボネートを含み、

40

【化 4 7】



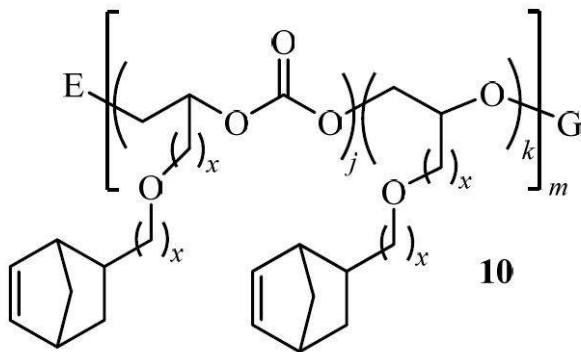
10

式中、E、G、j、k、およびmは、上で定義されるとおりである。

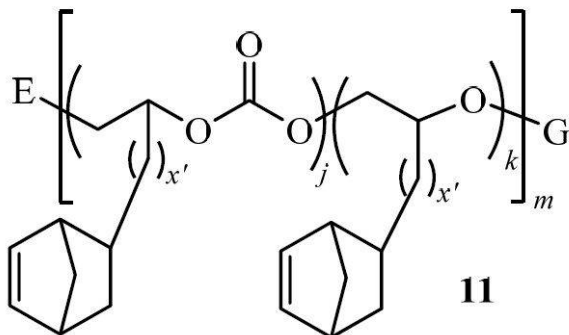
【0389】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式10または式11の構造を有するポリカーボネートを含み、

【化 4 8】



20



30

式中、E、G、j、k、およびmは、上で定義されるとおりであり、各xは、独立して、0～4を含めた整数であり、各x'は、独立して、0～8を含めた整数である。

【0390】

ある実施形態において、ポリカーボネートは、ポリマー鎖におけるカーボネートおよびエーテル結合のパーセンテージによって特徴付けられ得る。この特徴はまた、式1から11に示されるように、j:kの比率として表すことができる。ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式1から11のうちのいずれかの構造を有するポリカーボネートを含み、jの値は、kの値よりも大きい。ある実施形態において、jの値は、kの値よりも少なくとも約10倍大きい。他の実施形態において、jの値は、kの値よりも少なくとも約20倍大きい。ある実施形態において、jの値は、kの値よりも少なくとも約50倍大きい。他の実施形態において、jの値は、kの値よりも少なくとも約100倍大きい。ある実施形態において、kの値は、0である。一部の実施形態において、ポリカーボネート組成物は、kの繰り返し単位(エーテル結合)を本質的に含まない。

40

【0391】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、式1から11のうちのいずれかの構造を

50

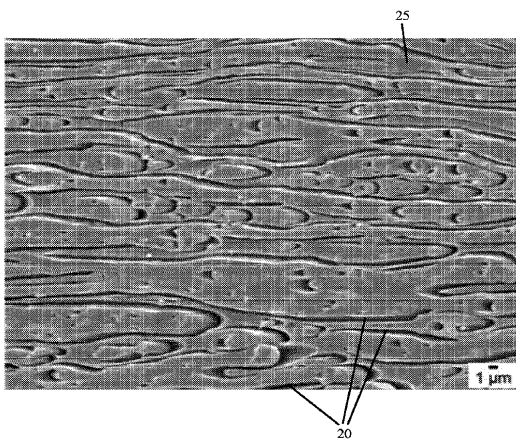
有するポリカーボネートを含み、APCの数平均分子量(M_N)は、約 1×10^4 g/molから約 2×10^6 g/molの範囲内である。ある実施形態において、 M_N は、約20,000 g/molから約400,000 g/molの範囲内である。ある実施形態において、 M_N は、約80,000 g/molから約300,000 g/molの範囲内である。ある実施形態において、 M_N は、約100,000 g/molから約300,000 g/molの範囲内である。ある実施形態において、 M_N は、約150,000 g/molから約250,000 g/molの範囲内である。

【0392】

ある実施形態において、ポリマーブレンドは、1から11のうちの2つ以上のランダム、ブロック、またはテーパー型コポリマーを含む。

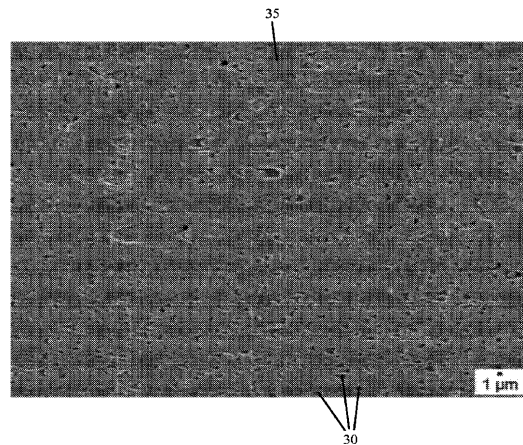
【図2】

Fig. 2



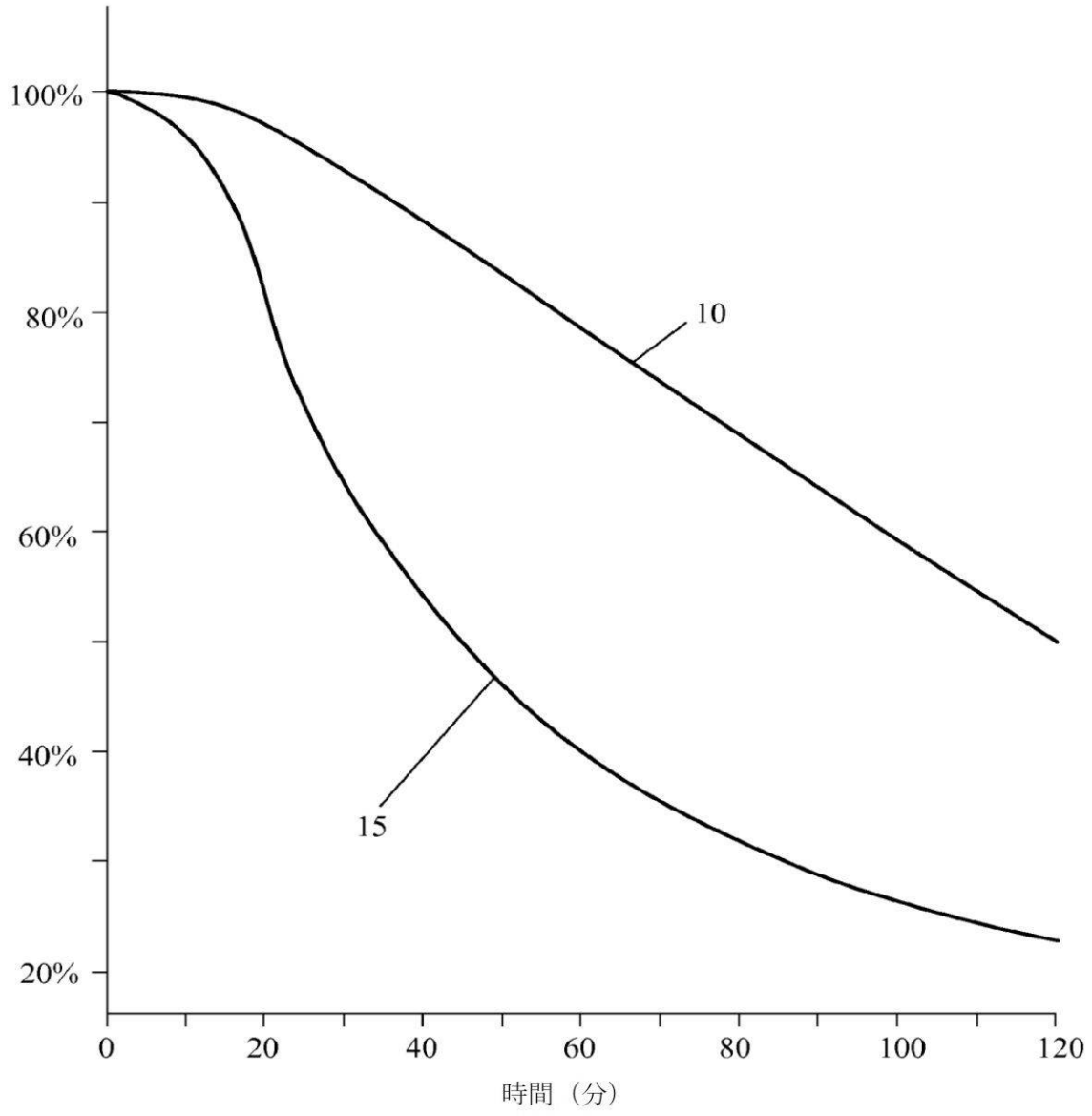
【図3】

Fig. 3



【 図 1 】

【 図 1 】



【 国際調査報告 】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT		International application No. PCT/US 11/55846
A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER IPC(8) - C08G 64/02 (2012.02) USPC - 525/461; 528/370, 421 According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC		
B. FIELDS SEARCHED Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols) IPC(8): C08G 64/02 (2012.02); USPC: 525/461; 528/370, 421 Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched USPC: 525/461; 528/370, 421 Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used) Google Scholar, Google Patents, PubWEST (PGPB,USPT,EPAB,JPAB) (Extrude, polymer, blend, polycarbonate, aliphatic, polyolefin, propylene, ethylene, styrene, PVC, compatible, temperature, plastic, film, food, package, injection, mold)		
C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT		
Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X Y	US 2009/0105443 A1 (BRACK, et al.) 23 Apr 2009 (23.04.2009) paragraphs [0028], [0074], [0105], [0116]-[0118], [0130], [0136]	1, 6-18, 19/(1, 6-18), 20-23, 25/(1, 6-18) ----- 2-5, 19/(2-5), 24, 25/(2-5)
Y	US 5,536,806 A (SANT'ANGELO) 16 Jul 1996 (16.07.1996) column 1, line 15-17, column 3, line 35-48	2-5, 19/(2-5), 24, 25/(2-5)
<input type="checkbox"/> Further documents are listed in the continuation of Box C. <input type="checkbox"/>		
* Special categories of cited documents: "A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance "E" earlier application or patent but published on or after the international filing date "L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified) "O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means "P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed "T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention "X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone "Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art "&" document member of the same patent family		
Date of the actual completion of the international search 23 Apr 2012 (23.04.2012)		Date of mailing of the international search report 27 APR 2012
Name and mailing address of the ISA/US Mail Stop PCT, Attn: ISA/US, Commissioner for Patents P.O. Box 1450, Alexandria, Virginia 22313-1450 Facsimile No. 571-273-3201		Authorized officer: Lee W. Young PCT Helpdesk: 571-272-4300 PCT OSP: 571-272-7774

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/US 11/55846

Box No. II Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:

2. Claims Nos.:
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:

3. Claims Nos.: 125-128
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:
 Group I: claims 1-25: directed to an extruded polymer blend comprising at least one aliphatic polycarbonate and at least one polyolefin.
 Group II: claims 26-56: directed to a polymer blend film comprising an aliphatic polycarbonate in combination with a non-aliphatic polycarbonate characterized by its oxygen permeability.
 Group III: claims 57-89: directed to a polymer blend comprising poly(propylene carbonate) and a polyolefin.
 Group IV: claims 90-124: directed to a plastic film comprising an aliphatic polycarbonate characterized by the film's stretch properties.

The inventions listed as Groups I-IV do not relate to a single general inventive concept under PCT Rule 13.1 because, under PCT Rule 13.2, they lack the same or corresponding special technical features for the following reasons:

Groups II-IV do not include the inventive concept of an extruded polymer blend comprising at least one aliphatic polycarbonate and at least one polyolefin, as required by Group I.

---Continued on Extra Sheet---

1. As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.
2. As all searchable claims could be searched without effort justifying additional fees, this Authority did not invite payment of additional fees.
3. As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:

4. No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims; it is covered by claims Nos.:
1-25

Remark on Protest

- The additional search fees were accompanied by the applicant's protest and, where applicable, the payment of a protest fee.
- The additional search fees were accompanied by the applicant's protest but the applicable protest fee was not paid within the time limit specified in the invitation.
- No protest accompanied the payment of additional search fees.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/US 11/55846

Box No. III Observations where unity of invention is lacking

Groups I, III, and IV does not include the inventive concept of a polymer blend comprising poly(propylene carbonate) and a polyolefin, as required by Group II.

Groups II-IV do not include the inventive concept of a polymer blend comprising poly(propylene carbonate) and a polyolefin, as required by Group III.

Groups I, II, and IV does not include the inventive concept of a plastic film comprising an aliphatic polycarbonate characterized by the film's stretch properties, as required by Group IV.

Groups I-IV may share the technical feature of an extruded polymer blend comprising at least one aliphatic polycarbonate and at least one polyolefin. However, this shared technical feature does not represent a contribution over the prior art of US 2009/0105443 A1 to Brack et al. (23 April 2009), which teaches the claimed blend at para [0116], [0118], [0130]. As the above blend was known at the time, as evidenced by the teaching of Brack, this cannot be considered a special technical feature that would otherwise unify the groups.

Groups I-IV therefore lack unity under PCT Rule 13 because they do not share a same or corresponding special technical feature.

Claims 125-128 are considered unsearchable because they are dependent claims that are not drafted in accordance with the second and third sentences of PCT Rule 6.4(a).

フロントページの続き

(51)Int.Cl. F I テーマコード(参考)
B 6 5 D 65/40 (2006.01) C 0 8 J 5/18 C E Z
 B 6 5 D 65/40 D

(81)指定国 AP(BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), EA(AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, T
 J, TM), EP(AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, R
 O, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OA(BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG), AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA,
 BB, BG, BH, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, H
 U, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KR, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI
 , NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US,
 UZ, VC, VN

(72)発明者 アレン, スコット ディー.
 アメリカ合衆国 ニューヨーク 1 4 8 5 0, イサカ, ダンビー ロード 9 5 0, スイー
 ト 1 9 8, ノボマー, インコーポレイテッド 気付

(72)発明者 ネイク, サンジーブ
 アメリカ合衆国 ニューヨーク 1 4 8 5 0, イサカ, ダンビー ロード 9 5 0, スイー
 ト 1 9 8, ノボマー, インコーポレイテッド 気付

F ターム(参考) 3E086 AA21 AA23 AB01 AC07 AD01 AD04 AD07 BA02 BA04 BA13
 BA15 BB01 BB51 CA01 CA23 CA27
 4F071 AA16 AA17 AA18A AA19A AA20 AA21 AA24 AA50 AH04 AH07
 BB06 BB07 BB08 BC01 BC12
 4J002 BB031 BB121 BB161 BD041 CG001 GG02