

(19) 日本国特許庁(JP)

(12) 特 許 公 報(B2)

(11) 特許番号

特許第6811531号  
(P6811531)

(45) 発行日 令和3年1月13日(2021.1.13)

(24) 登録日 令和2年12月17日(2020.12.17)

(51) Int.Cl.		F I
<b>CO8G 18/44</b>	<b>(2006.01)</b>	CO8G 18/44
<b>CO8G 18/42</b>	<b>(2006.01)</b>	CO8G 18/42
<b>CO8G 18/48</b>	<b>(2006.01)</b>	CO8G 18/48
CO8G 101/00	(2006.01)	CO8G 101:00

請求項の数 85 (全 206 頁)

(21) 出願番号	特願2015-540913 (P2015-540913)	(73) 特許権者	517433669
(86) (22) 出願日	平成25年11月7日(2013.11.7)		サウジ アラムコ テクノロジーズ カン パニー
(65) 公表番号	特表2015-535020 (P2015-535020A)		サウジアラビア王国 ダーラン 3 1 3 1 1, ピー. オー. ボックス 6 2
(43) 公表日	平成27年12月7日(2015.12.7)	(74) 代理人	100078282
(86) 国際出願番号	PCT/US2013/068932		弁理士 山本 秀策
(87) 国際公開番号	W02014/074706	(74) 代理人	100113413
(87) 国際公開日	平成26年5月15日(2014.5.15)		弁理士 森下 夏樹
審査請求日	平成28年11月7日(2016.11.7)	(74) 代理人	100181674
審査番号	不服2019-1890 (P2019-1890/J1)		弁理士 飯田 貴敏
審査請求日	平成31年2月12日(2019.2.12)	(74) 代理人	100181641
(31) 優先権主張番号	61/723,627		弁理士 石川 大輔
(32) 優先日	平成24年11月7日(2012.11.7)	(74) 代理人	230113332
(33) 優先権主張国・地域又は機関	米国 (US)		弁護士 山本 健策

最終頁に続く

(54) 【発明の名称】 高強度ポリウレタンフォーム組成物及び方法

(57) 【特許請求の範囲】

【請求項 1】

ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含むポリウレタンフォーム組成物の耐荷重特性または強度を増加させるための方法であって、ポリオール成分に1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを組み込むステップを含み、ポリカーボネートポリオールが、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合の間に形成される結合中、少なくとも85%のカルボネート結合を含み、前記フォームは、軟質ポリウレタンフォームであり、ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの5重量%~25重量%の量で添加される、方法。

【請求項 2】

ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの5重量%~10重量%の量で添加される、請求項1に記載の方法。

【請求項 3】

ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの10重量%~20重量%の量で添加される、請求項1に記載の方法。

【請求項 4】

ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの20重量%~25重量%の量で添加される、請求項1に記載の方法。

【請求項 5】

ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含むポリウレタンフォーム組成物の耐荷重特性または強度を増加させるための方法であって、ポリオール成分に、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを組み込むステップを含み、ポリカーボネートポリオールが、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合の間に形成される結合中、少なくとも85%のカルボネート結合を含み、前記フォームは、粘弾性ポリウレタンフォームであり、ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの10重量%～50重量%の量で添加される、方法。

【請求項6】

ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの10重量%～30重量%の量で添加される、請求項5に記載の方法。

10

【請求項7】

ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの30重量%～50重量%の量で添加される、請求項5に記載の方法。

【請求項8】

ポリオール成分が、ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、脂肪族ポリオール、及びこれらのうちいずれか2つ以上の混合物からなる群から選択される1つ以上のポリオールを含む、請求項1～7のいずれか一項に記載の方法。

【請求項9】

ポリオール成分が、ポリエーテルポリオールを実質的に含む、請求項8に記載の方法。

20

【請求項10】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のASTM D3574に従って測定される圧縮力撓み(CFD)値、引張強度または引裂強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度より大きい、請求項1～7のいずれか一項に記載の方法。

【請求項11】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の引張強度、引裂強度またはCFD値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の引張強度、引裂強度またはCFD値より少なくとも10%大きい、請求項10に記載の方法。

30

【請求項12】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の引張強度、引裂強度またはCFD値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の引張強度、引裂強度またはCFD値より少なくとも30%大きい、請求項10に記載の方法。

【請求項13】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の引張強度、引裂強度またはCFD値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の引張強度、引裂強度またはCFD値より少なくとも50%大きい、請求項10に記載の方法。

40

【請求項14】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の引張強度、引裂強度またはCFD値が、添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の密度に関して標準化され、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の引張強度、引裂強度またはCFD値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度に関して標準化される、請求項10～13のいずれか一項に記載の方法。

【請求項15】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物と、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物とが、同じ密度を有するように、フォ

50

ーム組成物が処方される、請求項 11 ~ 14 のいずれか一項に記載の方法。

【請求項 16】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の ASTM D3574 に従って測定される密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より低く、添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の ASTM D3574 に従って測定される圧縮力撓み (CFD) 値、引張強度または引裂強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の CFD 値、引張強度または引裂強度より大きい、請求項 1 ~ 7 のいずれか一項に記載の方法。

【請求項 17】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より少なくとも 10% 低い、請求項 16 に記載の方法。

【請求項 18】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より少なくとも 30% 低い、請求項 16 に記載の方法。

【請求項 19】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より少なくとも 50% 低い、請求項 16 に記載の方法。

【請求項 20】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の CFD 値、引張強度または引裂強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の CFD 値、引張強度または引裂強度より少なくとも 10% 大きい、請求項 16 ~ 19 のいずれか一項に記載の方法。

【請求項 21】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の CFD 値、引張強度または引裂強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の CFD 値、引張強度または引裂強度より少なくとも 30% 大きい、請求項 16 ~ 19 のいずれか一項に記載の方法。

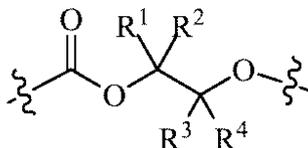
【請求項 22】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の CFD 値、引張強度または引裂強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の CFD 値、引張強度または引裂強度より少なくとも 50% 大きい、請求項 16 ~ 19 のいずれか一項に記載の方法。

【請求項 23】

ポリカーボネートポリオールが、構造：

【化 84】



式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び  $R^4$  は、ポリマー鎖における各出現において、-H、フッ素、場合により置換されている  $C_{1-40}$  脂肪族基、場合により置換されている  $C_{1-20}$  ヘテロ脂肪族基、及び場合により置換されているアリール基からなる群から独立して選択され、ここで、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び  $R^4$  のうちいずれか 2 つ以上が、介在原子と一緒にあって、1 つ以上のヘテロ原子を場合により含有する 1 つ以上の場合により置換されている環を形成してよい；を有する第 1 の繰り返し単位を含有する、請求項 1 ~ 7 の

10

20

30

40

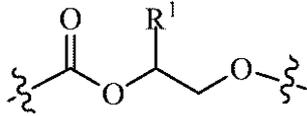
50

いずれか一項に記載の方法。

【請求項 24】

ポリカーボネートポリオールが、構造：

【化 85】



を有する第 1 の繰り返し単位を含有する、請求項 23 に記載の方法。

10

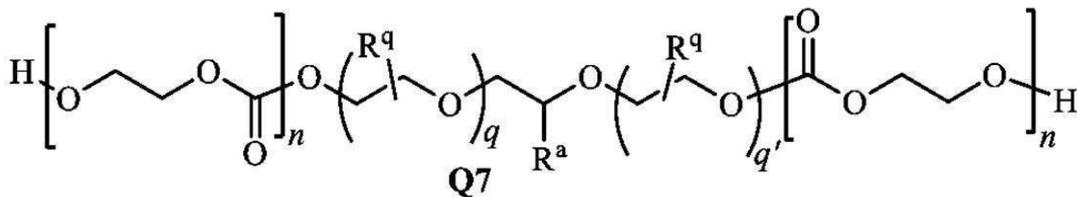
【請求項 25】

式中 R<sup>1</sup> は、ポリマー鎖中における各出現において、独立して、-H、または -CH<sub>3</sub> である、請求項 24 に記載の方法。

【請求項 26】

ポリカーボネートポリオールが、構造：

【化 90】



20

(式中、

R<sup>q</sup> は、ポリマー鎖における各出現において独立して -H 又は -CH<sub>3</sub> であり；

R<sup>a</sup> は、-H 又は -CH<sub>3</sub> であり；

q 及び q' は、独立して、2 ~ 40 の整数であり；

n は、各出現において独立して、2 ~ 100 の整数である)

を有する、請求項 9 に記載の方法。

【請求項 27】

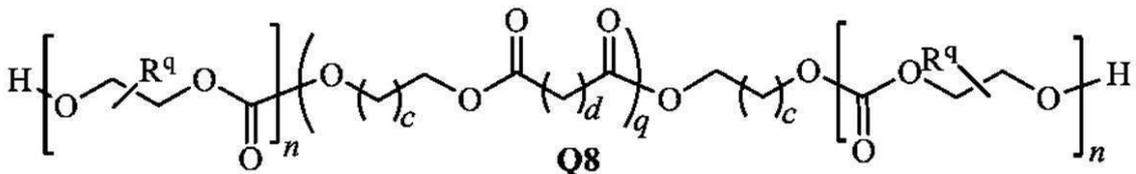
30

ポリオール成分が、ポリエステルポリオールを実質的に含む、請求項 8 に記載の方法。

【請求項 28】

ポリカーボネートポリオールが、構造：

【化 91】



40

(式中、

R<sup>q</sup> は、ポリマー鎖における各出現において独立して -H 又は -CH<sub>3</sub> であり；

各 q は、独立して、2 ~ 40 の整数であり；

n は、各出現において独立して、2 ~ 100 の整数であり；

c は、ポリマー鎖における各出現において独立して、0 ~ 6 の整数であり；

d は、ポリマー鎖における各出現において独立して、1 ~ 11 の整数である)

を有する、請求項 27 に記載の方法。

【請求項 29】

ポリカーボネートポリオールが、500 g/mol ~ 20,000 g/mol の Mn を有することを特徴とする、請求項 1 ~ 28 のいずれか一項に記載の方法。

50

## 【請求項 30】

ポリカーボネートポリオールが、1 , 000 g / mol ~ 5 , 000 g / mol の Mn を有することを特徴とする、請求項 1 ~ 28 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 31】

ポリカーボネートポリオールが、1 , 000 g / mol ~ 3 , 000 g / mol の Mn を有することを特徴とする、請求項 1 ~ 28 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 32】

ポリカーボネートポリオールが、1 , 000 g / mol の Mn を有することを特徴とする、請求項 1 ~ 28 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 33】

ポリカーボネートポリオールが、1 , 200 g / mol の Mn を有することを特徴とする、請求項 1 ~ 28 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 34】

ポリカーボネートポリオールが、1 , 500 g / mol の Mn を有することを特徴とする、請求項 1 ~ 28 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 35】

ポリカーボネートポリオールが、2 , 000 g / mol の Mn を有することを特徴とする、請求項 1 ~ 28 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 36】

ポリカーボネートポリオールが、2 , 500 g / mol の Mn を有することを特徴とする、請求項 1 ~ 28 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 37】

ポリカーボネートポリオールが、3 , 000 g / mol の Mn を有することを特徴とする、請求項 1 ~ 28 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 38】

脂肪族ポリカーボネートポリオールは、鎖端の 98% 超が、イソシアネートに対して反応性の基であることを特徴とする、請求項 1 ~ 37 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 39】

脂肪族ポリカーボネートポリオールは、鎖端の 99% 超が、イソシアネートに対して反応性の基であることを特徴とする、請求項 1 ~ 37 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 40】

脂肪族ポリカーボネートポリオールは、鎖端の 99.5% 超が、イソシアネートに対して反応性の基であることを特徴とする、請求項 1 ~ 37 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 41】

イソシアネートに対して反応性の鎖端が、-OH 基を含む、請求項 38 ~ 40 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 42】

ポリカーボネートポリオールが、1 つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合の間に形成される結合中、少なくとも 95% のカルボナート結合を含む、請求項 1 ~ 41 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 43】

ポリカーボネートポリオールが、1 つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合の間に形成される結合中、少なくとも 99% のカルボナート結合を含む、請求項 1 ~ 41 のいずれか一項に記載の方法。

## 【請求項 44】

ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含むポリウレタンフォーム組成物であって、ポリオール成分が、1 つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含み、添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の ASTM D 3574 に従って測定される圧縮力撓み (CFD) 値、引張強度または引裂強度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組

10

20

30

40

50

成物のCFD値、引張強度または引裂強度より大きく、ポリカーボネートポリオールが、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合の間に形成される結合中、少なくとも85%のカルボネート結合を含むことを特徴とし、前記フォームが、軟質ポリウレタンフォームであり、ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの5重量%～25重量%の量で存在する、ポリウレタンフォーム組成物。

【請求項45】

ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの5重量%～10重量%の量で存在する、請求項44に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項46】

ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの10重量%～20重量%の量で存在する、請求項44に記載のポリウレタンフォーム組成物。

10

【請求項47】

ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの20重量%～25重量%の量で存在する、請求項44に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項48】

ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含むポリウレタンフォーム組成物であって、ポリオール成分が、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含み、添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のASTM D3574に従って測定される圧縮力撓み(CFD)値、引張強度または引裂強度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度より大きく、ポリカーボネートポリオールが、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合の間に形成される結合中、少なくとも85%のカルボネート結合を含むことを特徴とし、前記フォームが、粘弾性ポリウレタンフォームであり、ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの10重量%～50重量%の量で存在する、ポリウレタンフォーム組成物。

20

【請求項49】

ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの10重量%～30重量%の量で存在する、請求項48に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項50】

ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの30重量%～50重量%の量で存在する、請求項48に記載のポリウレタンフォーム組成物。

30

【請求項51】

ポリオール成分が、ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、脂肪族ポリオール、及びこれらのうちいずれか2つ以上の混合物からなる群から選択される1つ以上のポリオールを含む、請求項44～50のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項52】

ポリオール成分が、ポリエーテルポリオールを実質的に含む、請求項51に記載の組成物。

【請求項53】

ポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度より少なくとも10%大きい、請求項44～50のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

40

【請求項54】

ポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度より少なくとも30%大きい、請求項44～50のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項55】

50

ポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度より少なくとも50%大きい、請求項44~50のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項56】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の密度に関して標準化され、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の引張強度、引裂強度またはCFD値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度に関して標準化される、請求項53~55のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

10

【請求項57】

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物と、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物とが、同じ密度を有するように、フォーム組成物が処方される、請求項53~55のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項58】

ポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のASTM D3574に従って測定される密度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より低い、請求項44~50のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

20

【請求項59】

ポリカーボネートポリオールを含むフォームの密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より少なくとも10%低い、請求項58に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項60】

ポリカーボネートポリオールを含むフォームの密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より少なくとも30%低い、請求項58に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項61】

ポリカーボネートポリオールを含むフォームの密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より少なくとも50%低い、請求項58に記載のポリウレタンフォーム組成物。

30

【請求項62】

測定されるCFD値、引張強度または引裂強度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度より少なくとも10%大きい、請求項58に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項63】

測定されるCFD値、引張強度または引裂強度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度より少なくとも30%大きい、請求項58に記載のポリウレタンフォーム組成物。

40

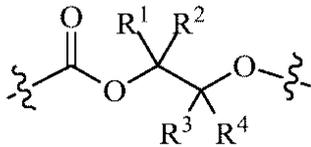
【請求項64】

測定されるCFD値、引張強度または引裂強度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値、引張強度または引裂強度より少なくとも50%大きい、請求項58に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項65】

ポリカーボネートポリオールが、構造：

## 【化 8 6】



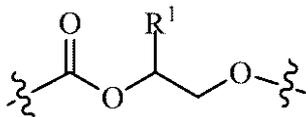
式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ は、ポリマー鎖における各出現において、 $-H$ 、フッ素、場合により置換されている $C_{1-40}$ 脂肪族基、場合により置換されている $C_{1-20}$ ヘテロ脂肪族基、及び場合により置換されているアリール基からなる群から独立して選択され、ここで、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ のうちいずれか2つ以上が、介在原子と一緒にあって、1つ以上のヘテロ原子を場合により含有する1つ以上の場合により置換されている環を形成してよい；を有する第1の繰り返し単位を含有する、請求項44～50のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

10

## 【請求項 6 6】

ポリカーボネートポリオールが、構造：

## 【化 8 7】



20

；を有する第1の繰り返し単位を含有する、請求項65に記載の組成物。

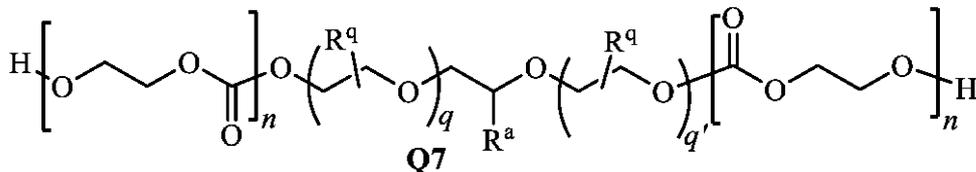
## 【請求項 6 7】

式中、 $R^1$ は、ポリマー鎖における各出現において、独立して、 $-H$ 、または $-CH_3$ である、請求項66に記載の組成物。

## 【請求項 6 8】

ポリオール成分が、構造：

## 【化 9 2】



30

( 式中、

$R^q$ は、ポリマー鎖における各出現において独立して $-H$ 又は $-CH_3$ であり；

$R^a$ は、 $-H$ 又は $-CH_3$ であり；

$q$ 及び $q'$ は、独立して、 $2 \sim 40$ の整数であり；

$n$ は、各出現において独立して、 $2 \sim 100$ の整数である )

を有するポリカーボネートポリオールを含む、請求項52に記載のポリウレタンフォーム組成物。

40

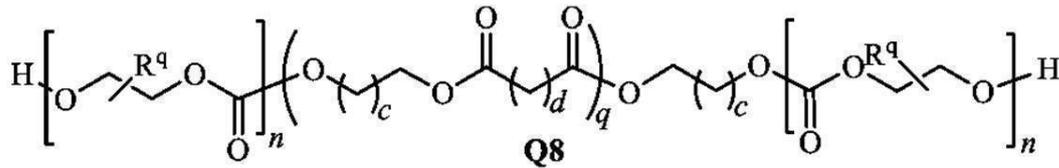
## 【請求項 6 9】

ポリオール成分が、ポリエステルポリオールを含む、請求項51に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 7 0】

ポリオール成分が、構造：

## 【化 9 3】



(式中、

$R^q$  は、ポリマー鎖における各出現において独立して - H 又は -  $CH_3$  であり；

各  $q$  は、独立して、2 ~ 40 の整数であり；

$n$  は、各出現において独立して、2 ~ 100 の整数であり；

$c$  は、ポリマー鎖における各出現において独立して、0 ~ 6 の整数であり；

$d$  は、ポリマー鎖における各出現において独立して、1 ~ 11 の整数である)

を有するポリカーボネートポリオールを含む、請求項 6 9 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 7 1】

ポリカーボネートポリオールが、500 g/mol ~ 20,000 g/mol の  $M_n$  を有することを特徴とする、請求項 4 4 ~ 7 0 のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 7 2】

ポリカーボネートポリオールが、1,000 g/mol ~ 5,000 g/mol の  $M_n$  を有することを特徴とする、請求項 4 4 ~ 7 0 のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 7 3】

ポリカーボネートポリオールが、1,000 g/mol ~ 3,000 g/mol の  $M_n$  を有することを特徴とする、請求項 4 4 ~ 7 0 のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 7 4】

ポリカーボネートポリオールが、1,000 g/mol の  $M_n$  を有することを特徴とする、請求項 4 4 ~ 7 0 のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 7 5】

ポリカーボネートポリオールが、1,200 g/mol の  $M_n$  を有することを特徴とする、請求項 4 4 ~ 7 0 のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 7 6】

ポリカーボネートポリオールが、1,500 g/mol の  $M_n$  を有することを特徴とする、請求項 4 4 ~ 7 0 のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 7 7】

ポリカーボネートポリオールが、2,000 g/mol の  $M_n$  を有することを特徴とする、請求項 4 4 ~ 7 0 のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 7 8】

ポリカーボネートポリオールが、2,500 g/mol の  $M_n$  を有することを特徴とする、請求項 4 4 ~ 7 0 のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 7 9】

ポリカーボネートポリオールが、3,000 g/mol の  $M_n$  を有することを特徴とする、請求項 4 4 ~ 7 0 のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 8 0】

ポリカーボネートポリオールは、鎖端の 98% 超が、イソシアネートに対して反応性の基であることを特徴とする、請求項 4 4 ~ 7 9 のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## 【請求項 8 1】

10

20

30

40

50

ポリカーボネートポリオールは、鎖端の99%超が、イソシアネートに対して反応性の基であることを特徴とする、請求項44~79のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項82】

ポリカーボネートポリオールは、鎖端の99.5%超が、イソシアネートに対して反応性の基であることを特徴とする、請求項44~79のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項83】

イソシアネートに対して反応性の鎖端が、-OH基を含む、請求項80~82のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

10

【請求項84】

ポリカーボネートポリオールが、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合の間に形成される結合中、少なくとも95%のカルボナート結合を含む、請求項44~83のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【請求項85】

ポリカーボネートポリオールが、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合の間に形成される結合中、少なくとも99%のカルボナート結合を含む、請求項44~83のいずれか一項に記載のポリウレタンフォーム組成物。

【発明の詳細な説明】

【技術分野】

20

【0001】

本発明は、ポリウレタンフォームの分野に関する。より特定的には、本発明は、ポリウレタンフォームの強度を増加させるための添加剤及び方法に関する。

【背景技術】

【0002】

(発明の背景)

ポリイソシアネートと反応性ポリマーとの間の反応から誘導されるポリウレタンフォームは、家具、マットレス、消費財、建設材料、自動車部品などの絶縁から製造までの範囲の用途において広範に用いられている。

【0003】

30

ポリウレタンフォームのコストは、石油系原料のコスト及び該原料を作製するのに用いられるエネルギーの増加に起因して近年劇的に増加している。同時に、堅牢であって、長い耐用寿命及び改良された持続可能性プロファイルを有する高性能な材料に対しての市場の要求が増加している。残念なことに、これらの課題に対しての現在の解決策は、他を犠牲にして1つの性質を高める傾向にある。

【0004】

例えば、より強いフォームを作製するために、フォームの密度が典型的には増加されて、これにより、材料のより多くの使用と共に、材料を輸送するのに必要とされる無駄なエネルギーを生じさせる。このことは、フォームが車両の一部となる輸送用途において悪化する、なぜなら、より重たいフォームが、フォームの耐用寿命を通しての燃料の使用を増加させることにより、財政上及び環境上の大きな損害をもたらすからである。こうして、多くの場合、コストまたは重量の考慮に基づいて、耐久性により劣るまたはより低い性能のフォームが選択されるという妥協がなされる。

40

【0005】

同様に、バイオ系原料の添加によってフォーム組成物をより持続可能にするための努力が、入り交じった結果をもたらしている。ダイズまたはトウモロコシ系の原料をポリウレタンフォーム配合剤に組み込むと、多くの場合、望ましい性質の犠牲をもたらし、許容可能な性能を得るために該処方物に他の変化が必要とされ - さらにこれらの譲歩によっても、約10%を超えるバイオ系材料を組み込むことは困難であった。また、このアプローチの真の持続可能性についても、バイオ系原料を生成するのに必要とされる土地及び水の

50

使用ならびに石油源を含めて特に全体として見たときに - 特に、これらの材料がフォーム配合剤に及ぼす負の影響を補うためにさらなる努力または石油系添加剤が必要とされるときに、疑問であり得る。

【0006】

ポリウレタンフォームが、CO<sub>2</sub>から製造されたポリオールから処方され得ることが以前に報告されている（例えば、共有の特許出願第WO2010/028362号及びPCT/US12/047967号を参照されたい）。これらのフォーム組成物は、改良された二酸化炭素排出量を有する、なぜなら、ポリオール塊の最大で50%が、さもなければ大気中に放出される不要なCO<sub>2</sub>から誘導され得るからである。この方略は、潜在的な温室ガスを隔離することに加えて、ポリオールを製造するのに利用される化石由来の原料の量を最大で50%カットすることを可能にする。

10

にもかかわらず、改良された性能特性を有するポリウレタンフォーム組成物、特に、現在の材料と同等またはこれより軽い重量で優れた強度及び耐久性を有する処方物への要求が残っている。

【先行技術文献】

【特許文献】

【0007】

【特許文献1】国際公開第2010/028362号

【発明の概要】

【課題を解決するための手段】

20

【0008】

上記のように、エポキシドCO<sub>2</sub>コポリマー（脂肪族ポリカーボネートポリオール）を組み込んだポリウレタンフォームが記載されている。にもかかわらず、ある一定の態様において、これらのフォームは、課題を提示している。B側における第1のポリオール成分としてエポキシドCO<sub>2</sub>コポリマーを用いて処方されたフォームは、（例えば、高粘度のため）処方することが困難であり得る。さらに、生成されたフォームは、脆弱であり、または、フォーム - 特に軟質フォームにおいて望ましいある一定の他の物性に欠く場合がある。一態様において、本発明は、エポキシドCO<sub>2</sub>コポリマーを含むことで、常套のフォーム配合剤のB側において添加剤として用いられるとき、これらの負の影響を及ぼさず、しかし、代わりに、その存在により、強度、圧縮力撓み、耐溶剤性などの所望の性質を予想外にも高めるという認識を包含する。

30

【0009】

したがって、一態様において、本発明は、ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含む高強度ポリウレタンフォーム組成物であって、ポリオール成分が、約2重量%～約50重量%の1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含む、ポリオールのブレンドを含んでいる、上記組成物を包含する。ある一定の実施形態において、ポリオール成分の残りが、市販のフォーム配合剤において現在用いられている常套のポリエーテルまたはポリエステルポリオールを含む。本発明のフォーム組成物は、ポリカーボネートポリオールを用いずに処方されたフォームよりも高い圧縮力撓み及び高い引裂抵抗を含めた改良された物理的強度を予想外にも実証する。重要なことに、これらの改良されたフォーム組成物は、初期のフォームよりも高い密度を有さず、快適さに関連する他の因子、耐久性、絶縁値などは、犠牲にされない。

40

【0010】

別の態様において、本発明は、ポリウレタンフォーム組成物を強化する方法を包含する。ある一定の実施形態において、該方法は、ポリウレタンフォーム配合剤のポリオール含量の約2重量%～約50重量%を、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールによって置き換えるステップを含む。

【0011】

別の態様において、本発明は、フォーム配合剤のための強度向上添加剤を提供する。本発明の添加剤は、ポリエーテルまたはポリエステルポリオールとのブレンドに好適であっ

50

て、かつ、フォーム配合剤における存在が、完成したフォーム組成物の圧縮力撓み値、引裂抵抗またはヒステリシスのうち1つ以上を増加させることを特徴とする脂肪族ポリカーボネートポリオールを含む。

【0012】

別の態様において、本発明は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールをフォーム配合剤に添加することから得られる高強度ポリウレタンフォーム組成物から作製される物品を包含する。かかる物品は、輸送用途のための低密度の座席材料や、自動車製造、履物用フォーム、オフィス家具、マットレス、スポーツ用品、建設材料及び消費財のための非座席用フォーム成分を含む。

定義

10

【0013】

具体的な官能基及び化学用語の定義を、以下により詳細に記載する。本発明の目的で、化学元素は、CAS version, Handbook of Chemistry and Physics, 75<sup>th</sup> Ed. (内表紙)の元素周期表に従って特定され、具体的な官能基は、当該書に記載されているように一般に定義される。加えて、有機化学の一般原理、ならびに具体的な官能基及び反応性は、Organic Chemistry, Thomas Sorrell, University Science Books, Sausalito, 1999; Smith and March March's Advanced Organic Chemistry, 5<sup>th</sup> Edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001; Larock, Comprehensive Organic Transformations, VCH Publishers, Inc., New York, 1989; Carruthers, Some Modern Methods of Organic Synthesis, 3<sup>rd</sup> Edition, Cambridge University Press, Cambridge, 1987; に記載されており、各々の全内容は、参照により本明細書に組み込まれる。

20

【0014】

本発明のある一定の化合物は、1つ以上の不斉中心を含んでいてよく、そのため、種々の立体異性体、例えば、エナンチオマー及び/またはジアステレオマーで存在してよい。そのため、本発明の化合物及びその組成物は、個々のエナンチオマー、ジアステレオマーまたは幾何異性体の形態であってもよく、立体異性体の混合物の形態であってもよい。ある一定の実施形態において、本発明の化合物は、エナンチオピュアな化合物である。ある一定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。

【0015】

30

さらに、本明細書に記載されているある一定の化合物は、別途示されていない限り、ZまたはEいずれかの異性体として存在し得る1つ以上の二重結合を有してよい。本発明は、他の異性体を実質的に含まない個々の異性体として、代替的には、種々の異性体の混合物として、例えば、エナンチオマーのラセミ混合物としての化合物を付加的に包含する。本発明は、上記化合物自体に加えて、1つ以上の化合物を含む組成物も包含する。

【0016】

本明細書において用いられているとき、用語「異性体」は、任意ならびに全ての幾何異性体及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とき、シス-及びトランス-異性体、E-及びZ-異性体、R-及びS-エナンチオマー、ジアステレオマー、(D)-異性体、(L)-異性体、これらのラセミ混合物、ならびにこれらの他の混合物を含む。例えば、立体異性体は、いくつか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付与されてよく、「立体化学的に富化されている」と称されてもよい。

40

【0017】

特定のエナンチオマーが好ましい場合、いくつかの実施形態において、反対のエナンチオマーを実質的に含まずに付与されてもよく、「光学的に富化されている」と称されてもよい。「光学的に富化されている」とは、本明細書において用いられているとき、化合物またはポリマーが、有意に高い割合の一方のエナンチオマーから構成されていることを意味する。ある一定の実施形態において、化合物は、少なくとも約90重量%の好ましいエナンチオマーから構成されている。他の実施形態において、化合物は、少なくとも約95

50

重量%、98重量%、または99重量%の好ましいエナンチオマーから構成されている。好ましいエナンチオマーは、キラル高速液体クロマトグラフィ（HPLC）ならびにキラル塩の形成及び結晶化を含めた、当業者に公知の任意の方法によってラセミ混合物から単離されても、不斉合成によって調製されてもよい。例えば、Jacques, et al., *Enantiomers, Racemates and Resolutions* (Wiley Interscience, New York, 1981); Wilen, S.H., et al., *Tetrahedron* 33:2725 (1977); Eliel, E.L. *Stereochemistry of Carbon Compounds* (McGraw-Hill, NY, 1962); Wilen, S.H. *Tables of Resolving Agents and Optical Resolutions* p.268 (E.L. Eliel, Ed., Univ. of Notre Dame Press, Notre Dame, IN 1972)を参照されたい。

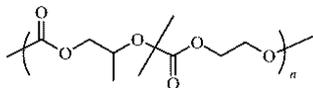
【0018】

用語「エポキシド」は、本明細書において用いられているとき、置換または非置換オキシランを称する。かかる置換オキシランとして、一置換オキシラン、二置換オキシラン、三置換オキシラン、及び四置換オキシランが挙げられる。かかるエポキシドは、本明細書に定義されているようにさらに場合により置換されてよい。ある一定の実施形態において、エポキシドは、単一のオキシラン部位を含む。ある一定の実施形態において、エポキシドは、2つ以上のオキシラン部位を含む。

【0019】

用語「ポリマー」は、本明細書において用いられているとき、高い相対分子質量の分子を称し、その構造は、低い相対分子質量の分子から実際にまたは概念的に誘導される複数の繰り返し単位を含む。ある一定の実施形態において、ポリマーは、CO<sub>2</sub>及びエポキシドから誘導される実質的に交互の単位から構成される（例えば、ポリ（エチレンカーボネート））。ある一定の実施形態において、本発明のポリマーは、2種以上の異なるエポキシドモノマーを組み込んだコポリマー、ターポリマー、ヘテロポリマー、ブロックコポリマー、またはテーパーヘテロポリマーである。かかるより高分子量のポリマーの構造的表示に関して、スラッシュによって分離されている異なるモノマー単位の鎖状化を示す慣例が、本明細書において用いられてよい。

【化1】



これらの構造は、別途特定されない限り、表示されている異なるモノマー単位があらゆる比率で組み込まれているコポリマーを包含すると解釈されたい。この表示は、ランダム、テーパー、ブロックコポリマー、及びこれらのいずれか2つ以上の組み合わせを表すことも意図されており、別途特定されない限り、これらの全てが暗示されている。

【0020】

用語「ハロ」及び「ハロゲン」は、本明細書において用いられているとき、フッ素（フルオロ、-F）、塩素（クロロ、-Cl）、臭素（ブロモ、-Br）、及びヨウ素（ヨード、-I）から選択される原子を称する。

【0021】

用語「脂肪族」または「脂肪族基」は、本明細書において用いられているとき、直鎖状（すなわち、非分岐状）、分岐状、または環状（縮合、架橋、及びスピロ縮合多環式を含む）であってよく、完全に飽和されているか、または1つ以上の不飽和単位を含有しているが芳香族ではない炭化水素部位を示す。別途特定されない限り、脂肪族基は、1～40個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、脂肪族基は、1～20個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、脂肪族基は、3～20個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、脂肪族基は、1～12個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、脂肪族基は、1～8個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、脂肪族基は、1～6個の炭素原子を含有する。いくつか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、いくつかの実施形態において、

10

20

30

40

50

脂肪族基は、1～4個の炭素原子を含有し、いくつか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、いくつか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、限定されないが、線状または分岐状のアルキル、アルケニル、及びアルキニル基、ならびにこれらのハイブリッド、例えば、(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)アルケニルが挙げられる。

#### 【0022】

用語「ヘテロ脂肪族」は、本明細書において用いられているとき、1つ以上の炭素原子が、酸素、硫黄、窒素、またはリンからなる群から選択される1つ以上の原子によって独立して置き換えられている脂肪族基を称する。ある一定の実施形態において、1～6個の炭素原子が、酸素、硫黄、窒素、またはリンからなる群から選択される1つ以上の原子によって独立して置き換えられている。ヘテロ脂肪族基は、置換または非置換、分岐状または非分岐状、環状または非環状であってよく、飽和、不飽和または部分不飽和基を含む。

10

#### 【0023】

本明細書において用いられているとき、用語「二価C<sub>1-8</sub>(またはC<sub>1-3</sub>)の飽和または不飽和の、直鎖または分岐状の炭化水素鎖」は、本明細書において定義されているように直鎖または分岐状である二価アルキル、アルケニル、及びアルキニル鎖を称する。

#### 【0024】

用語「不飽和」は、本明細書において用いられているとき、部位が、1つ以上の二重または三重結合を有することを意味する。

20

#### 【0025】

単独で、またはより大きな部位の一部として用いられている用語「脂環式」、「炭素環」または「炭素環式」は、本明細書に記載されているとき、3～12員を有する飽和または部分不飽和の環状脂肪族単環式または多環式環系を称し、該脂肪族環系は、上記かつ本明細書に記載のように場合により置換されている。脂環式基として、非限定的に、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、及びシクロオクタジエニルが挙げられる。いくつか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。用語「脂環式」、「炭素環」または「炭素環式」は、1つ以上の芳香族または非芳香族環に縮合している脂肪族環、例えば、デカヒドロナフチルまたはテトラヒドロナフチルも含み、ここで、結合ラジカルまたは点は、脂肪族環上にある。ある一定の実施形態において、用語「3～7員の炭素環」は、3～7員の飽和または部分不飽和の単環式炭素環式環を称する。ある一定の実施形態において、用語「3～8員の炭素環」は、3～8員の飽和または部分不飽和の単環式炭素環式環を称する。ある一定の実施形態において、用語「3～14員の炭素環」及び「C<sub>3-14</sub>炭素環」は、3～8員の飽和もしくは部分不飽和の単環式炭素環式環、または7～14員の飽和もしくは部分不飽和の多環式炭素環式環を称する。

30

#### 【0026】

用語「アルキル」は、本明細書において用いられているとき、単一の水素原子の除去により1～6個の炭素原子を含有する脂肪族部位から誘導される飽和の直鎖または分岐鎖炭化水素ラジカルを称する。別途特定されない限り、アルキル基は、1～12個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、アルキル基は、1～8個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、アルキル基は、1～6個の炭素原子を含有する。いくつか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、いくつか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、いくつかの実施形態において、アルキル基は、1～3個の炭素原子を含有し、いくつか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、限定されないが、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、

40

50

n - ウンデシル、ドデシルなどが挙げられる。

【0027】

用語「アルケニル」は、本明細書において用いられているとき、単一の水素原子の除去により少なくとも1つの炭素 - 炭素二重結合を有する直鎖または分岐鎖脂肪族部位から誘導された一価の基を示す。別途特定されない限り、アルケニル基は、2 ~ 12個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、アルケニル基は、2 ~ 8個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、アルケニル基は、2 ~ 6個の炭素原子を含有する。いくつか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、いくつか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、いくつか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、いくつか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、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 - イルなどが挙げられる。

10

【0028】

用語「アルキニル」は、本明細書において用いられているとき、単一の水素原子の除去により少なくとも1つの炭素 - 炭素三重結合を有する直鎖または分岐鎖脂肪族部位から誘導された一価の基を示す。別途特定されない限り、アルキニル基は、2 ~ 12個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、アルキニル基は、2 ~ 8個の炭素原子を含有する。ある一定の実施形態において、アルキニル基は、2 ~ 6個の炭素原子を含有する。いくつか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、いくつか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、いくつか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、いくつか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、限定されないが、エチニル、2 - プロピニル (プロパルギル)、1 - プロピニルなどが挙げられる。

20

【0029】

用語「アルコキシ」は、本明細書において用いられているとき、先に定義されているように、酸素原子を通して親分子に結合しているアルキル基を称する。アルコキシの例として、限定されないが、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、及びn - ヘキソキシが挙げられる。

【0030】

用語「アシル」は、本明細書において用いられているとき、カルボニル - 含有官能性基、例えば、 $-C(=O)R'$  を称し、ここで、 $R'$  は、水素または場合により置換されている脂肪族、ヘテロ脂肪族、複素環式、アリール、ヘテロアリール基であり、あるいは、(例えば、水素、または脂肪族、ヘテロ脂肪族、アリール、もしくはヘテロアリール部位によって)置換されている酸素または窒素含有官能性基(例えば、カルボン酸、エステル、またはアミド官能性基を形成する)である。用語「アシルオキシ」は、ここで用いられるとき、酸素原子を通して親分子に結合しているアシル基を称する。

30

【0031】

単独で、または「アラルキル」「アラルコキシ」もしくは「アリーロキシアルキル」におけるようなより大きな部位の一部として用いられている用語「アリール」は、合計5 ~ 20環員を有する単環式及び多環式環系を称し、ここで、該系における少なくとも1つの環が芳香族であり、該系における各環が、3 ~ 12環員を含有する。用語「アリール」は、用語「アリール環」と互換的に用いられてよい。本発明のある一定の実施形態において、「アリール」は、限定されないが、1つ以上の置換基を持ってよいフェニル、ピフェニル、ナフチル、アントラシルなどが挙げられる芳香族環系を称する。1つ以上のさらなる環、例えば、ベンゾフラニル、インダニル、フタルイミジル、ナフトイミジル、フェナントリジニル、またはテトラヒドロナフチルなどに縮合している基もまた、本明細書において用いられているとき、用語「アリール」の範囲内に含まれる。ある一定の実施形態において、用語「6 ~ 10員のアリール」及び「 $C_{6-10}$ アリール」は、フェニルまたは8 ~ 10員の多環式アリール環を称する。

40

50

## 【 0 0 3 2 】

単独で、またはより大きな部位、例えば、「ヘテロアラルキル」もしくは「ヘテロアラルコキシ」の一部として用いられている用語「ヘテロアリール」及び「ヘテロアラ - 」は、5 ~ 14 個の環原子、好ましくは5、6、9または10個の環原子を有し；環状アレイにおいて共有されている6、10、または14個の電子を有し；かつ、炭素原子に加えて、1 ~ 5 個のヘテロ原子を有する基を称する。用語「ヘテロ原子」は、窒素、酸素、または硫黄を称し、窒素または硫黄の任意の酸化形態、及び塩基性窒素の任意の第4級化形態を含む。ヘテロアリール基として、非限定的に、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、イソオキサゾリル、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、ベンゾフラニル及びプテリジニルが挙げられる。用語「ヘテロアリール」及び「ヘテロアラ - 」は、本明細書において用いられているとき、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している基が挙げられ、ここで、結合ラジカルまたは点は、ヘテロ芳香族環上にある。非限定的な例として、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、シンノリニル、フタラジニル、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、及びピリド[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、単環式であっても二環式であってもよい。用語「ヘテロアリール」は、用語「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」と互換的に用いられてよく、これらの用語のいずれもが、場合により置換されている環を含む。用語「ヘテロアラルキル」は、ヘテロアリールによって置換されているアルキル基を称し、アルキル及びヘテロアリール部は、独立して、場合により置換されている。ある一定の実施形態において、用語「5 ~ 10員のヘテロアリール」は、窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される1 ~ 3個のヘテロ原子を有する5 ~ 6員のヘテロアリール環、または窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される1 ~ 4個のヘテロ原子を有する8 ~ 10員の二環式ヘテロアリール環を称する。ある一定の実施形態において、用語「5 ~ 12員のヘテロアリール」は、窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される1 ~ 3個のヘテロ原子を有する5 ~ 6員のヘテロアリール環、または窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される1 ~ 4個のヘテロ原子を有する8 ~ 12員の二環式ヘテロアリール環を称する。

## 【 0 0 3 3 】

用語「複素環」、「ヘテロシクリル」、「複素環式ラジカル」、及び「複素環式環」は、本明細書において用いられているとき、互換的に用いられ、先に定義されているように、飽和または部分不飽和のいずれかであり、炭素原子に加えて、1つ以上、好ましくは1 ~ 4個のヘテロ原子を有する安定な5 ~ 7員の単環式または7 ~ 14員の多環式複素環式部位を称する。複素環の環原子を参照して用いられているとき、用語「窒素」は、置換窒素を含む。例として、酸素、硫黄または窒素から選択される0 ~ 3個のヘテロ原子を有する飽和または部分不飽和環において、窒素は、N(3, 4 - ジヒドロ - 2H - ピロリルであるとき)、NH(ピロリジニルであるとき)、または<sup>+</sup>NR(N - 置換ピロリジニルであるとき)であってよい。いくつかの実施形態において、用語「3 ~ 7員の複素環式」は、窒素、酸素、または硫黄から独立して選択される1 ~ 2個のヘテロ原子を有する3 ~ 7員の飽和または部分不飽和の単環式複素環式環を称する。いくつかの実施形態において、用語「3 ~ 12員の複素環式」は、窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される1 ~ 2個のヘテロ原子を有する3 ~ 8員の飽和または部分不飽和の単環式複素環式環、または窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される1 ~ 3個のヘテロ原子を有する7 ~ 12員の飽和または部分不飽和の多環式複素環式環を称する。

## 【 0 0 3 4 】

10

20

30

40

50

複素環式環は、安定な構造を生ずる任意のヘテロ原子または炭素原子におけるペンダント基に結合してよく、任意の環原子が、場合により置換されていてよい。かかる飽和または部分不飽和の複素環式ラジカルの例として、非限定的に、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、ジオキサソラニル、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、及びキヌクリジニルが挙げられる。用語「複素環」、「ヘテロシクリル」、「ヘテロシクリル環」、「複素環式基」、「複素環式部位」、及び「複素環式ラジカル」は、本明細書において互換的に用いられ、ヘテロシクリル環が1つ以上のアリール、ヘテロアリール、または脂環式環に縮合している基、例えば、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、またはテトラヒドロキノリニルも含み、ここで、結合ラジカルまたは点は、ヘテロシクリル環上にある。ヘテロシクリル基は、単環式であっても二環式であってもよい。用語「ヘテロシクリルアルキル」は、ヘテロシクリルによって置換されているアルキル基を称し、ここで、アルキル及びヘテロシクリル部は、独立して、場合により置換されている。

10

## 【0035】

本明細書において用いられているとき、用語「部分不飽和」は、少なくとも1つの二重または三重結合を含む環部位を称する。用語「部分不飽和」は、複数の不飽和部位を有する環を包含すると企図されるが、本明細書において定義されているように、アリールまたはヘテロアリール部位を含むことは企図されない。

20

## 【0036】

本明細書において記載されているように、本発明の化合物は、「場合により置換されている」部位を含有していてよい。一般に、用語「置換されている」は、用語「場合により」が先行しているか否かによらず、指示されている部位の1つ以上の水素が好適な置換基によって置き換えられていることを意味する。別途示されていない限り、「場合により置換されている」基は、該基の各置換可能位置において好適な置換基を有していてよく、任意の所与の構造における1を超える位置が、特定された基から選択される1を超える置換基によって置換されていてよいとき、該置換基は、あらゆる位置において同じであっても異なっていてよい。本発明によって想定される置換基の組み合わせは、好ましくは、安定な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である。用語「安定な」は、本明細書において用いられているとき、生成、検出、ならびに、ある一定の実施形態においては、回収、精製、及び本明細書に開示されている目的のうち1つ以上のための使用を可能にする条件に供したときに実質的に改変されない化合物を称する。

30

## 【0037】

「場合により置換されている」基の置換可能な炭素原子上の好適な一価の置換基は、独立に、ハロゲン； $-(CH_2)_{0-4}R^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}OR^\circ$ ； $-O-(CH_2)_{0-4}C(O)OR^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}CH(OR^\circ)_2$ ； $-(CH_2)_{0-4}SR^\circ$ ； $R^\circ$ で置換されていてよい $-(CH_2)_{0-4}Ph$ ； $R^\circ$ で置換されていてよい $-(CH_2)_{0-4}O(CH_2)_{0-1}Ph$ ； $R^\circ$ で置換されていてよい $-CH=CHPh$ ； $-NO_2$ ； $-CN$ ； $-N_3$ ； $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)_2$ ； $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)R^\circ$ ； $-N(R^\circ)C(S)R^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)NR^\circ_2$ ； $-N(R^\circ)C(S)NR^\circ_2$ ； $-(CH_2)_{0-4}N(R^\circ)C(O)OR^\circ$ ； $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)R^\circ$ ； $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)NR^\circ_2$ ； $-N(R^\circ)N(R^\circ)C(O)OR^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}C(O)R^\circ$ ； $-C(S)R^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}C(O)OR^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}C(O)N(R^\circ)_2$ ； $-(CH_2)_{0-4}C(O)SR^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}C(O)OSiR^\circ_3$ ； $-(CH_2)_{0-4}OC(O)R^\circ$ ； $-OC(O)(CH_2)_{0-4}SR^\circ$ 、 $SC(S)SR^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}SC(O)R^\circ$ ； $-(CH_2)_{0-4}C(O)NR^\circ_2$ ； $-C(S)NR^\circ_2$ ； $-C(S)SR^\circ$ ； $-SC(S)SR^\circ$ 、 $-(CH_2)_{0-4}OC(O)NR^\circ_2$ ； $-C(O)N(OR^\circ)R^\circ$ ； $-C(O)C(O)R^\circ$ ； $-C(O)CH_2$

40

50

$C(O)R^\circ$ ;  $-C(NOR^\circ)R^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}SSR^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}S(O)_2R^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}S(O)_2OR^\circ$ ;  $-(CH_2)_{0-4}OS(O)_2R^\circ$ ;  $-S(O)_2NR^\circ_2$ ;  $-(CH_2)_{0-4}S(O)R^\circ$ ;  $-N(R^\circ)S(O)_2NR^\circ_2$ ;  $-N(R^\circ)S(O)_2R^\circ$ ;  $-N(OR^\circ)R^\circ$ ;  $-C(NH)NR^\circ_2$ ;  $-P(O)_2R^\circ$ ;  $-P(O)R^\circ_2$ ;  $-OP(O)R^\circ_2$ ;  $-OP(O)(OR^\circ)_2$ ;  $SiR^\circ_3$ ;  $-(C_{1-4} \text{直鎖または分岐状アルキレン})O-N(R^\circ)_2$ ; または  $-(C_{1-4} \text{直鎖または分岐状アルキレン})C(O)O-N(R^\circ)_2$  であり、ここで、各  $R^\circ$  は、以下に定義されているように置換されていてよく、独立して、水素、 $C_{1-8}$  脂肪族、 $-CH_2Ph$ 、 $-O(CH_2)_{0-1}Ph$ 、または窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する 5~6 員の飽和、部分不飽和、もしくはアリール環であり、あるいは、上記定義にかかわらず、 $R^\circ$  の独立する 2 つの出現が、これらの介在原子と一緒に、以下に定義されているように置換されていてよい、窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する 3~12 員の飽和、部分不飽和またはアリール単または多環式環を形成する。

10

## 【0038】

$R^\circ$  (または、2 つの独立する  $R^\circ$  の出現をこれらの介在原子と一緒にすることによって形成される環) 上の好適な一価の置換基は、独立して、ハロゲン、 $-(CH_2)_{0-2}R$ 、 $-(\text{ハロ}R)$ 、 $-(CH_2)_{0-2}OH$ 、 $-(CH_2)_{0-2}OR$ 、 $-(CH_2)_{0-2}CH(OR)_2$ ;  $-O(\text{ハロ}R)$ 、 $-CN$ 、 $-N_3$ 、 $-(CH_2)_{0-2}C(O)R$ 、 $-(CH_2)_{0-2}C(O)OH$ 、 $-(CH_2)_{0-2}C(O)OR$ 、 $-(CH_2)_{0-4}C(O)N(R)_2$ ;  $-(CH_2)_{0-2}SR$ 、 $-(CH_2)_{0-2}SH$ 、 $-(CH_2)_{0-2}NH_2$ 、 $-(CH_2)_{0-2}NHR$ 、 $-(CH_2)_{0-2}NR_2$ 、 $-NO_2$ 、 $-SiR_3$ 、 $-OSiR_3$ 、 $-C(O)SR$ 、 $-(C_{1-4} \text{直鎖または分岐状アルキレン})C(O)OR$ 、または  $-SSR$  であり、ここで、各  $R$  は、非置換であるか、または、「ハロ」が先行する場合には 1 つ以上のハロゲンによってのみ置換されており、また、 $C_{1-4}$  脂肪族、 $-CH_2Ph$ 、 $-O(CH_2)_{0-1}Ph$ 、または窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する 5~6 員の飽和、部分不飽和、もしくはアリール環から独立して選択される。 $R^\circ$  の飽和炭素原子上の好適な二価の置換基として、 $=O$  及び  $=S$  が挙げられる。

20

## 【0039】

「場合により置換されている」基の飽和炭素原子上の好適な二価の置換基として、以下： $=O$ 、 $=S$ 、 $=NNR^*_2$ 、 $=NNHC(O)R^*$ 、 $=NNHC(O)OR^*$ 、 $=NNHS(O)_2R^*$ 、 $=NR^*$ 、 $=NOR^*$ 、 $-O(C(R^*_2))_{2-3}O-$ 、または  $-S(C(R^*_2))_{2-3}S-$ ；が挙げられ、ここで、 $R^*$  のそれぞれ独立する出現は、水素、以下に定義されているように置換されていてよい  $C_{1-6}$  脂肪族、または窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する非置換の 5~6 員の飽和、部分不飽和、もしくはアリール環から選択される。「場合により置換されている」基の隣接する置換可能な炭素に結合している好適な二価の置換基として： $-O(CR^*_2)_{2-3}O-$  が挙げられ、ここで、 $R^*$  のそれぞれ独立する出現は、水素、以下に定義されているように置換されていてよい  $C_{1-6}$  脂肪族、または窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する非置換の 5~6 員の飽和、部分不飽和、もしくはアリール環から選択される。

30

40

## 【0040】

$R^*$  の脂肪族基上の好適な置換基として、ハロゲン、 $-R$ 、 $-(\text{ハロ}R)$ 、 $-OH$ 、 $-OR$ 、 $-O(\text{ハロ}R)$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)OH$ 、 $-C(O)OR$ 、 $-NH_2$ 、 $-NHR$ 、 $-NR_2$ 、または  $-NO_2$  が挙げられ、ここで、各  $R$  は、非置換であるか、または、「ハロ」が先行する場合には 1 つ以上のハロゲンによってのみ置換されており、また、独立して、 $C_{1-4}$  脂肪族、 $-CH_2Ph$ 、 $-O(CH_2)_{0-1}Ph$ 、または窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される 0~4 個のヘテロ原子を有する 5~6 員の飽和、部分不飽和、もしくはアリール環である。

50

## 【0041】

「場合により置換されている」基の置換可能な窒素上の好適な置換基として、 $-R^+$ 、 $-NR^+_2$ 、 $-C(O)R^+$ 、 $-C(O)OR^+$ 、 $-C(O)C(O)R^+$ 、 $-C(O)CH_2C(O)R^+$ 、 $-S(O)_2R^+$ 、 $-S(O)_2NR^+_2$ 、 $-C(S)NR^+_2$ 、 $-C(NH)NR^+_2$ 、または $-N(R^+)S(O)_2R^+$ が挙げられ；ここで、各 $R^+$ は、独立して、水素、以下に定義されているように置換されていてよい $C_{1-6}$ 脂肪族、非置換 $-OPh$ 、または窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される0~4個のヘテロ原子を有する非置換5~6員の飽和、部分不飽和、もしくはアリール環であり、あるいは、上記定義にかかわらず、2つの独立する $R^+$ の出現が、これらの介在原子と一緒に、窒素、酸素、または硫黄から独立して選択される0~4個のヘテロ原子を有する、非置換の3~12員の飽和、部分不飽和、またはアリールの単または二環式環を形成する。

10

## 【0042】

$R^+$ の脂肪族基上の好適な置換基は、独立して、ハロゲン、 $-R$ 、 $-(\text{ハロ}R)$ 、 $-OH$ 、 $-OR$ 、 $-O(\text{ハロ}R)$ 、 $-CN$ 、 $-C(O)OH$ 、 $-C(O)OR$ 、 $-NH_2$ 、 $-NHR$ 、 $-NR_2$ 、または $-NO_2$ であり、ここで、各 $R$ は、非置換であるか、または、「ハロ」が先行する場合には1つ以上のハロゲンによってのみ置換されており、独立して、 $C_{1-4}$ 脂肪族、 $-CH_2Ph$ 、 $-O(CH_2)_{0-1}Ph$ 、または窒素、酸素、もしくは硫黄から独立して選択される0~4個のヘテロ原子を有する5~6員の飽和、部分不飽和、もしくはアリール環である。

20

## 【0043】

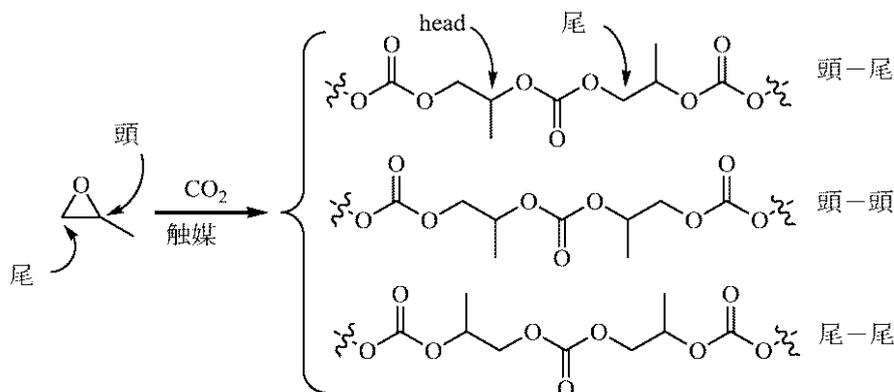
置換基が本明細書において記載されているとき、用語「ラジカル」または「場合により置換されているラジカル」が用いられる場合がある。これに関連して、「ラジカル」は、置換基が結合している構造への接続に利用できる位置を有する部位または官能基を意味する。一般に、接続点は、置換基が、置換基というよりもむしろ独立する中性分子であると、水素原子を持つこととなる。用語「ラジカル」または「場合により置換されているラジカル」は、したがって、これに関連して、「基」または「場合により置換されている基」と互換可能である。

## 【0044】

本明細書において用いられているとき、用語「頭-尾」または「HT」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称する。例えば、ポリ(プロピレンカーボネート)(PPC)の文脈において、用語「頭-尾」は、以下に表示する3つの位置化学的可能性に基づいている：

30

## 【化2】



40

## 【0045】

用語「頭-尾比」または(H:T)は、全ての他の位置化学的可能性の総計に対する頭-尾連結の割合を称する。ポリマー構造の図示に関して、モノマー単位の具体的な位置化学的配向が本明細書においてポリマー構造の表示において示されていることがあるが、これは、ポリマー構造を示されている位置化学的配置に限定することを意図しておらず、

50

別途特定されない限り、図示されているもの、反対の位置化学、ランダム混合物、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、及び/またはエナンチオリッチな材料、ならびにこれらのいずれかの組み合わせを含めた全ての位置化学的配置を包含すると解釈されるべきである。

【 0 0 4 6 】

本明細書において用いられているとき、用語「アルコキシル化」は、分子上の1つ以上の官能基（通常、官能基は、アルコール、アミン、またはカルボン酸であるが、これらに厳密に限定されない）が、ヒドロキシ末端アルキル鎖に付加されていることを意味する。アルコキシル化化合物は、単一のアルキル基を含んでいてもよく、ヒドロキシ末端ポリエーテルなどのオリゴマー部位であってもよい。アルコキシル化材料は、官能基をエポキシドで処理することによって親化合物から誘導され得る。

10

例えば、本発明は以下の項目を提供する。

(項目1)

ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含むポリウレタンフォーム組成物の耐荷重特性を増加させるための方法であって、ポリオール成分に、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを組み込むステップを含み、ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約50重量%、約5重量%～約25重量%、約2重量%～約10重量%、約10重量%～約20重量%、約20重量%～約30重量%、または約30重量%～約50重量%の量で添加される、前記方法。

20

(項目2)

ポリオール成分が、ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、脂肪族ポリオール、及びこれらのうちいずれか2つ以上の混合物からなる群から選択される1つ以上のポリオールを含み；好ましくは、ポリオール成分が、ポリエーテルポリオールを実質的に含む、項目1に記載の方法。

(項目3)

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のASTM D3574に従って測定される圧縮力撓み(CFD)値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値より大きい、項目1に記載の方法。

30

(項目4)

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のCFD値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%または少なくとも50%大きい、項目3に記載の方法。

(項目5)

CFD値が、比較されるフォーム組成物の密度に関して標準化される、項目3または4に記載の方法。

(項目6)

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物と、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物とが、実質的に同じ密度を有するように、フォーム組成物が処方される、項目3または4に記載の方法。

40

(項目7)

フォーム組成物が、軟質ポリウレタンフォームを含み、またはフォーム組成物が、粘弾性ポリウレタンフォームを含み、またはフォーム組成物が、硬質ポリウレタンフォームを含む、項目1に記載の方法。

(項目8)

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のASTM D3574に従って測定される密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より低く、添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のASTM D3574に従って測定される圧縮力撓み(CFD)値が、添加されるポ

50

リカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値より大きい、項目1に記載の方法。

(項目9)

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも25%、少なくとも30%、少なくとも40%または少なくとも50%低い、項目8に記載の方法。

(項目10)

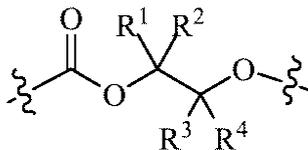
添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のCFD値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%または少なくとも50%大きい、項目8または9に記載の方法。

10

(項目11)

ポリカーボネートポリオールが、構造：

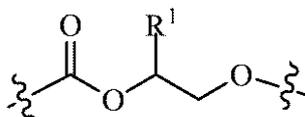
【化84】



20

式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、-H、フッ素、場合により置換されている $C_{1-40}$ 脂肪族基、場合により置換されている $C_{1-20}$ ヘテロ脂肪族基、及び場合により置換されているアシル基からなる群から独立して選択され、ここで、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ のうちいずれか2つ以上が、介在原子と一緒にあって、1つ以上のヘテロ原子を場合により含有する1つ以上の場合により置換されている環を形成してよい；を有する第1の繰り返し単位を含有し、好ましくは、ポリカーボネートポリオールが、構造：

【化85】



30

好ましくは、式中 $R^1$ は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、独立して、-H、または-CH<sub>3</sub>である；を有する第1の繰り返し単位を含有する、項目1に記載の方法。

(項目12)

ポリカーボネートポリオールが、約500g/mol~約20,000g/mol、約1,000g/mol~約5,000g/mol、約1,000g/mol~約3,000g/mol、もしくは約1,000g/mol~約3,000g/molのMnを有し、または約1,000g/mol、約1,200g/mol、約1,500g/mol、約2,000g/mol、約2,500g/molもしくは約3,000g/molのMnを有することを特徴とする、項目11に記載の方法。

40

(項目13)

脂肪族ポリカーボネートポリオールは、鎖端の98%超、99%超、または99.5%超が、イソシアネートに対して反応性の基であることを特徴とする、項目11に記載の方法。

(項目14)

イソシアネートに対して反応性の鎖端が、-OH基を含む、項目13に記載の方法。

50

(項目15)

ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含むポリウレタンフォーム組成物であって、ポリオール成分が、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含み、ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約50重量%、約5重量%～約25重量%、約2重量%～約10重量%、約10重量%～約20重量%、約20重量%～約30重量%、または約30重量%～約50重量%の量で存在し、添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のASTM D3574に従って測定される圧縮力撓み(CFD)値が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値より大きいことを特徴とする、前記ポリウレタンフォーム組成物。

10

(項目16)

ポリオール成分が、ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、脂肪族ポリオール、及びこれらのうちいずれか2つ以上の混合物からなる群から選択される1つ以上のポリオールを含み；好ましくは、ポリオール成分が、ポリエーテルポリオールを実質的に含む、項目15に記載のポリウレタンフォーム組成物。

(項目17)

ポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のCFD値が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%または少なくとも50%大きい、項目15に記載のポリウレタンフォーム組成物。

20

(項目18)

CFD値が、比較されるフォーム組成物の密度に関して標準化される、項目17に記載のポリウレタンフォーム組成物。

(項目19)

添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物と、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物とが、実質的に同じ密度を有するように、フォーム組成物が処方される、項目17に記載のポリウレタンフォーム組成物。

(項目20)

フォーム組成物が、軟質ポリウレタンフォームを含み、またはフォーム組成物が、粘弾性ポリウレタンフォームを含み、またはフォーム組成物が、硬質ポリウレタンフォームを含む、項目15に記載のポリウレタンフォーム組成物。

30

(項目21)

ポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のASTM D3574に従って測定される密度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より低い、項目15に記載のポリウレタンフォーム組成物。

(項目22)

ポリカーボネートポリオールを含むフォームの密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%または少なくとも50%低い、項目21に記載のポリウレタンフォーム組成物。

40

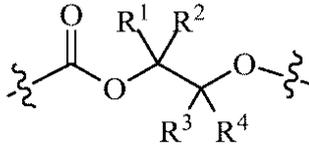
(項目23)

測定されるCFD値が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%または少なくとも50%大きい、項目21に記載のポリウレタンフォーム組成物。

(項目24)

ポリカーボネートポリオールが、構造：

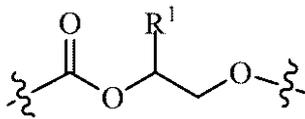
## 【化 8 6】



式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、 $-H$ 、フッ素、場合により置換されている $C_{1-40}$ 脂肪族基、場合により置換されている $C_{1-20}$ ヘテロ脂肪族基、及び場合により置換されているアリール基からなる群から独立して選択され、ここで、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ のうちいずれか2つ以上が、介在原子と一緒にあって、1つ以上のヘテロ原子を場合により含有する1つ以上の場合により置換されている環を形成していてもよい；を有する第1の繰り返し単位を含有し；好ましくは、ポリカーボネートポリオールが、構造：

10

## 【化 8 7】



；好ましくは、式中、 $R^1$ は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、独立して、 $-H$ 、または $-CH_3$ である；を有する第1の繰り返し単位を有する、項目15に記載のポリウレタンフォーム組成物。

20

## (項目 2 5)

ポリカーボネートポリオールが、約 $500\text{ g/mol}$ ～約 $20,000\text{ g/mol}$ 、約 $1,000\text{ g/mol}$ ～約 $5,000\text{ g/mol}$ 、もしくは約 $1,000\text{ g/mol}$ ～約 $3,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有し、または約 $1,000\text{ g/mol}$ 、約 $1,200\text{ g/mol}$ 、約 $1,500\text{ g/mol}$ 、約 $2,000\text{ g/mol}$ 、約 $2,500\text{ g/mol}$ もしくは約 $3,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有することを特徴とする、項目24に記載のポリウレタンフォーム組成物。

30

## (項目 2 6)

ポリカーボネートポリオールは、鎖端の98%超、99%超、または99.5%超が、イソシアネートに対して反応性の基であることを特徴とする、項目25に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## (項目 2 7)

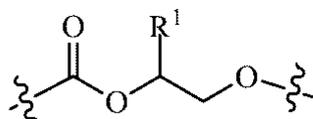
イソシアネートに対して反応性の鎖端が、 $-OH$ 基を含む、項目26に記載のポリウレタンフォーム組成物。

## (項目 2 8)

イソシアネート成分とポリオール成分との間の反応生成物を含む座席用フォームであって、ポリオール成分が、約5重量%～約20重量%の、構造：

40

## 【化 8 8】



式中、 $R^1$ は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、独立して、 $-H$ 、または $-CH_3$ である；を有する第1の繰り返し単位を有するポリカーボネートポリオールを含み、

50

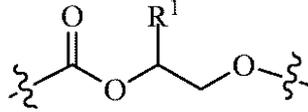
ポリカーボネートポリオールが、約 1,000 g/mol ~ 約 5,000 g/mol の Mn を有し；

ポリカーボネートポリオールは、鎖端の 99% 超が、イソシアネートに対して反応性である基であることを特徴とする、前記座席用フォーム。

(項目 29)

イソシアネート成分とポリオール成分との間の反応生成物を含む粘弾性フォーム物品であって、ポリオール成分が、約 5 重量% ~ 約 20 重量%の、構造：

【化 89】



10

式中、

R<sup>1</sup> は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、独立して、-H、または -CH<sub>3</sub> である；を有する第 1 の繰り返し単位を有するポリカーボネートポリオールを含み、

ポリカーボネートポリオールが、約 1,000 g/mol ~ 約 5,000 g/mol の Mn を有し；

ポリカーボネートポリオールは、鎖端の 99% 超が、イソシアネートに対して反応性である基であることを特徴とする、前記粘弾性フォーム物品。

20

【図面の簡単な説明】

【0047】

【図 1】図 1 は、58-103-C ポリオールを有する PU フォーム及びそれを有さない PU フォームの耐荷重性 (CFD) データのチャートを示す。

【図 2】図 2 は、74-276 ポリオールを有する PU フォーム及びそれを有さない PU フォームの耐荷重性 (CFD) データのチャートを示す。

【図 3】図 3 は、本発明の添加剤を有する PU フォーム、それを有さない PU フォーム及び他の添加剤を有する PU フォームの、密度で標準化した耐荷重性データのチャートを示す。

30

【図 4】図 4 は、本発明の添加剤を有する PU フォーム、それを有さない PU フォーム及び他の添加剤を有する PU フォームの、快適性因子データ (SAG 値) のチャートを示す。

【図 5】図 5 は、本発明の添加剤を有する PU フォーム、それを有さない PU フォーム及び他の添加剤を有する PU フォームの、快適性因子データ (SAG 値) のチャートを示す。

【図 6】図 6 は、本発明の特定の粘弾性 (VE) フォームの CFD 値を参照フォームと比較したグラフを示す。

【図 7】図 7 は、本発明の特定の VE フォームの CFD 値を参照フォームと比較したグラフを示す。

40

【図 8】図 8 は、本発明の特定の VE フォームのヒステリシスを参照フォームと比較したグラフを示す。

【図 9】図 9 は、本発明の特定の VE フォームの CFD 値を参照フォームと比較したグラフを示す。

【図 10】図 10 は、本発明の特定の VE フォームの CFD 値を参照フォームと比較したグラフを示す。

【図 11】図 11 は、本発明の特定の VE フォームのヒステリシスを参照フォームと比較したグラフを示す。

【図 12】図 12 は、本発明の特定の VE フォームの CFD 値を参照フォームと比較したグラフを示す。

50

【図 1 3】図 1 3 は、本発明の特定の V E フォームの C F D 値を参照フォームと比較したグラフを示す。

【図 1 4】図 1 4 は、本発明の特定の V E フォームのヒステリシスを参照フォームと比較したグラフを示す。

【図 1 5】図 1 5 は、本発明の特定の V E フォームの C F D 値を参照フォームと比較したグラフを示す。

【図 1 6】図 1 6 は、本発明の特定の V E フォームの C F D 値を参照フォームと比較したグラフを示す。

【図 1 7】図 1 7 は、本発明の特定の V E フォームのヒステリシスを参照フォームと比較したグラフを示す。

【図 1 8】図 1 8 は、参照 V E フォーム及び本発明により調製された V E フォームの D M A グラフを示す。

【図 1 9】図 1 9 は、本発明により調製された 2 つの V E フォーム試料の D M A グラフを示す。

【図 2 0】図 2 0 は、本発明により調製された 2 つの V E フォーム試料の D M A グラフを示す。

【図 2 1】図 2 1 は、参照 V E フォーム及び本発明により調製された V E フォームの D S C グラフを示す。

【図 2 2】図 2 2 は、本発明により調製された 2 つの V E フォーム試料の D S C グラフを示す。

【図 2 3】図 2 3 は、本発明により調製された 2 つの V E フォーム試料の D S C グラフを示す。

【図 2 4】図 2 4 は、ノボマー (Novomer) 及び市販のポリオールを基剤とする P U フォームの反発性のチャートを示す。

【図 2 5】図 2 5 は、ノボマー及び市販のポリオールを基剤とする P U フォームのヒステリシス特性のチャートを示す。

【図 2 6】図 2 6 は、ノボマー及び市販のポリオールを基剤とする P U フォームの耐荷重特性のチャートを示す。

【図 2 7】図 2 7 は、ノボマー及び市販のポリオールを基剤とする P U フォームの耐荷重特性のチャートを示す。

【図 2 8】図 2 8 は、ノボマー及び市販のポリオールを基剤とする P U フォームの耐荷重特性のチャートを示す。

【図 2 9】図 2 9 は、ノボマー及び市販のポリオールを基剤とする P U フォームの標準化した耐荷重特性のチャートを示す。

【図 3 0】図 3 0 は、ノボマー及び市販のポリオールを基剤とする P U フォームの標準化した耐荷重特性のチャートを示す。

【図 3 1】図 3 1 は、ノボマー及び市販のポリオールを基剤とする P U フォームの標準化した耐荷重特性のチャートを示す。

【図 3 2】図 3 2 は、ノボマー及び市販のポリオールを基剤とする P U フォームの支持因子 (support factor) データのチャートを示す。

【図 3 3】図 3 3 は、「発泡成形ポリウレタン 高弾性 ( H R ) 型座席用途 ( Cellular, Molded Polyurethane High Resilient (HR) Type Seat Applications )」のためのクライスラー材質標準 : M S - D C - 6 4 9 を示す。

【発明を実施するための形態】

【 0 0 4 8 】

ポリウレタン製造及び処方分野は、かなり進んでいる。いくつかの実施形態において、本明細書に提示されている新規の材料は、当該分野において周知の方法に従って処方され、加工され、用いられる。当該分野の知識を本明細書における開示及び教示と組み合わせることで、当業者は、組成物の変更、改変及び応用を容易に理解することができ、かかる変更は、本明細書に具体的に包含される。以下の参照文献は、ポリウレタンフォーム及

10

20

30

40

50

びエラストマーの処方、製造及び使用に関する情報を含有しており、これらの参照文献の各々の全内容が、参照により本明細書に組み込まれる。

【 0 0 4 9 】

Vahid Sendjarevic, et al.; Polymeric Foam And Foam Technology, 2<sup>nd</sup> edition, Hanser Gardner Publications; 2004 (ISBN 978-1569903360)

David Eaves; Handbook of Polymer Foam, Smithers Rapra Press; 2004 (ISBN 978-1859573884)

Shau-Tarng Lee et al.; Polymeric Foam: Science and Technology, CRC Press 2006 (ISBN 978-0849330759)

Kaneyoshi Ashida; Polyurethane and Related Foam: Chemistry and Technology, CRC Press; 2006 (ISBN 978-1587161599) 10

Handbook of Thermoplastic Elastomers, William Andrew Publishers, 2007 (ISBN 978-0815515494)

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

【 0 0 5 0 】

#### I. ポリウレタンフォームの強化方法

市販のポリウレタンフォーム組成物は、2つの成分：例えば、希釈剤、溶媒、共反応体などのさらなる材料と場合によりブレンドされている1つ以上のポリイソシアネート化合物を含有するイソシアネート成分（当該分野においてA側混合物と称される場合が多い）、及びさらなる反応体、溶媒、触媒、または添加剤と場合によりブレンドされている1つ 20  
以上のポリオールを含むポリオール成分（当該分野においてB側混合物と典型的には称される）；を組み合わせることによって典型的には製造される。

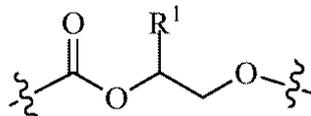
【 0 0 5 1 】

ある一定の実施形態において、本発明の方法は、ポリウレタンフォーム組成物のポリオール成分の一部を、CO<sub>2</sub>及び1つ以上のエポキシドの共重合から誘導される脂肪族ポリカーボネートポリオールを含む強度向上添加剤によって置換するステップを含む。

【 0 0 5 2 】

ある一定の実施形態において、該方法は、ポリウレタンフォーム配合剤のポリオール含量の約1重量%～約50重量%を脂肪族ポリカーボネートポリオールによって置き換えることを伴う。ある一定の実施形態において、この目的で用いられる脂肪族ポリカーボネートポリオールは、構造： 30

【化3】



式中、R<sup>1</sup>は、ポリマー鎖における各出現において、独立して、-H、-CH<sub>3</sub>、または-CH<sub>2</sub>CH<sub>3</sub>である；含む第1のポリマー繰り返し単位を有する。

【 0 0 5 3 】

ある一定の実施形態において、本発明は、ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含むポリウレタンフォーム組成物の耐荷重特性を増加させるための方法であって、ポリオール成分に、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを組み込むステップを含む方法を提供する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、フォーム配合剤のポリオール成分中に存在する全ポリオールの約1重量%～約50重量%の量で添加される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、フォーム配合剤のポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約50重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約5重量%～約25重量%の量で付与される。ある一定の実施形態に 50

において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約1重量%～約2重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約5重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約10重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約5重量%～約10重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約10重量%～約20重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約20重量%～約30重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約30重量%～約50重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約1重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約3重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約5重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約10重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約15重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約20重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約25重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約30重量%の量で付与される。ある一定の実施形態において、添加されるポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約40重量%の量で付与される。

#### 【0054】

ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールが添加されるポリオール成分中に存在する他のポリオールは：ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、ポリブタジエンポリオール、ポリスルフィドポリオール、天然油ポリオール、フッ化ポリオール、脂肪族ポリオール、ポリエーテルカーボネートポリオール、エポキシド-CO<sub>2</sub>共重合から誘導される以外のポリカーボネートポリオール、ならびに任意の2種以上のこれらの混合物からなる群から選択される。ある一定の実施形態において、ポリオール成分(すなわち、フォームのためのB側組成物中に存在してよい任意の他の非ポリオール成分、例えば、触媒、セルオープナー、発泡剤、安定剤、希釈剤、顔料などを除く)中に存在するポリオールの全重量の約50%～約99%が、ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、ポリブタジエンポリオール、ポリスルフィドポリオール、天然油ポリオール、フッ化ポリオール、脂肪族ポリオール、エポキシド-CO<sub>2</sub>共重合から誘導される以外のポリカーボネートポリオール、ならびに任意の2種以上のこれらの混合物からなる群から選択される1つ以上のポリオールを含む。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールが添加されるポリオール成分中に存在する他のポリオールは、ポリエーテルポリオールを実質的に含む。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールが添加されるポリオール成分中に存在する他のポリオールは、ポリエステルポリオールを実質的に含む。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールが添加されるポリオール成分中に存在する他のポリオールは、ポリ

10

20

30

40

50

エーテル及びポリエステルポリオールを本質的に含む。

【0055】

ある一定の実施形態において、本発明の方法は、ポリエーテルポリオールを含むB側組成物において、ポリオール成分としての、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを付与することによって高強度軟質ポリウレタンフォーム組成物を処方することを含む。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、最終のB側組成物が、100部のポリエーテルポリオールを基準にして約1～約100重量部のポリカーボネートポリオールを含有するような量で付与される。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリカーボネートポリオールが、得られるB側処方物中、100部のポリエーテルポリオールを基準にして、約5部、約10部、約20部、約30部、約40部、約60部、約80部、または約100部を含むような量で添加される。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある一定の実施形態において、添加される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリ(エチレンカーボネート)を含む。ある一定の実施形態において、添加される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリ(エチレン-コ-プロピレンカーボネート)を含む。ある一定の実施形態において、該方法は、脂肪族ポリカーボネートポリオール及びポリエーテルポリオールの混合物を攪拌及び/または加熱するさらなるステップを含む。ある一定の実施形態において、攪拌及び/または加熱する該ステップを含む方法は、ポリカーボネートポリオール及びポリエーテルポリオールの実質的に均一な混合物が形成されるまで実施される。

10

20

【0056】

ある一定の実施形態において、本発明の方法は、該方法を用いて処方されたフォームが、ポリカーボネートポリオールを付与するステップを用いず処方される対応するフォームよりも高い強度を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、(ASTM D3574-08試験Eによって測定される)破断点引張強度；(ASTM D3574-08試験Fによって測定される)引裂強度；(ASTM D3574-08試験Cによって測定される)圧縮力撓み(CFD)；ならびに(ASTM D3574-08試験Kによって測定される)140 22時間の乾熱エージング後の引張強度及び伸びのうち1つ以上の特性が、ポリカーボネートポリオールを添加するステップを用いず処方される対応する参照フォームのものと比較して向上されることを特徴とする。

30

【0057】

ある一定の実施形態において、本発明方法は、生成されたフォームが高い圧縮力撓みを有することを特徴とする。既存の技術では、かかるCFDでは、充填ポリオールを組み込むことによって良好な快適特性を有する軟質フォームが得られ得るのみである。充填ポリオールの使用は、コストの視点から望ましくない可能性があり、残存VOC、例えば、スチレンの存在に起因する懸念を上昇させる。残存VOCは、完成したフォームにおいて臭気公害を引き起こし、フォームから作製された物品に曝されるものに対して負の健康上の影響を及ぼし得る。本発明者らは、エポキシドCO<sub>2</sub>コポリマーの添加により強化されたフォームが、ASTM D3574-08試験Cによって測定される、独自に高いCFD値を有し、充填ポリオールの添加によって達成されるCFD値を満足するまたは超えるが、充填ポリオールに関連する付随の問題を有さないことを見出した。このように、ある一定の実施形態において、本発明は、高CFDのフォームを作製する方法を包含する。

40

【0058】

ある一定の実施形態において、本発明は、高強度ポリウレタンフォーム組成物(強化フォーム配合剤を示す)を処方する方法であって、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを、B側処方物に添加するステップを含み、強化フォームの、ASTM D3574-08試験Cによって測定されるその圧縮力撓み(CFD)値によって示される荷重負担能力が、参照フォーム配合剤を示す、添加されるポリカーボネートポリオールを用いず処方される対応するフォーム組成物のCFD値を超える(すなわち、比較は、ポリカーボネートポリオールを参照フォームのB側に

50

存在するポリオール部分で置換したことを除き同様に処方された2つのフォーム間のものである；かかる比較の非限定例は、重要なことには、他のフォーム成分の比または同定についていずれの他の添加または実質的な変化もさせない正当な評価で、以下の実施例セクションにおいて付与されている)ことを特徴とする方法を提供する。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるように、参照処方物において1つ以上のポリオールの一部を置換することによって、脂肪族ポリカーボネートポリオールをB側処方物に添加することを含む。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤のCFD値が、参照フォーム配合剤のCFD値より少なくとも10%大きいことを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤のCFD値が参照フォームのCFD値よりも少なくとも10%大きい、少なくとも20%大きい、少なくとも30%大きい、少なくとも40%大きい、少なくとも50%大きい、または少なくとも100%大きいことを特徴とする。ある一定の実施形態において、強化フォーム及び参照フォームのCFD値は、これらが比較される前にフォームの密度に関して標準化される。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム組成物及び参照フォーム組成物が実質的に同じ密度を有することを特徴とする。

10

## 【0059】

ある一定の実施形態において、本発明は、高強度ポリウレタンフォーム組成物(強化フォーム配合剤を示す)を処方する方法であって、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールをB側処方物に添加するステップを含み、強化フォーム配合剤が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するフォーム組成物(参照フォーム配合剤を示す)よりも低い密度を有することを特徴とし、ASTM D3574-08試験Cによって求められる強化フォームの耐荷重特性(CFD)が参照フォームのものと等しいまたはこれより大きいことをさらに特徴とする方法を提供する。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるように、参照処方物において1つ以上のポリオールの一部を置換することによって、脂肪族ポリカーボネートポリオールをB側処方物に添加することを含む。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の密度が参照フォーム配合剤の密度よりも少なくとも10%低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の密度が参照フォームの密度よりも少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%、または少なくとも50%低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の密度が参照フォームの密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%、または少なくとも50%低い、強化フォームのCFDは、参照フォームのCFDと少なくとも等しい、これより少なくとも10%大きい、少なくとも20%大きい、少なくとも30%大きい、少なくとも40%大きい、少なくとも50%大きい、少なくとも75%大きい、または少なくとも100%大きいことを特徴とする。

20

30

## 【0060】

ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤が、約2.6ポンド/立方フィート(pcf)未満の密度、及び25%撓みで少なくとも0.4psiのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFDの組み合わせを有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、CFD値が25%撓みで少なくとも0.45psi、25%撓みで少なくとも0.5psi、または25%撓みで少なくとも0.52psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、ASTM D3574-08試験Cによって測定される強化フォーム配合剤のCFD値が、50%撓みで少なくとも0.5psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、ASTM D3574-08試験Cによって測定される強化フォーム配合剤のCFD値が、50%撓みで少なくとも0.55psi、50%撓みで少なくとも0.60psi、50%撓みで少なくとも0.65psi、50%撓みで少なくとも0.7psi

40

50

、または50%撓みで少なくとも0.75psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、ASTM D3574-08試験Cによって測定される強化フォーム配合剤のCFD値が、65%撓みで少なくとも0.7psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、ASTM D3574-08試験Cによって測定される強化フォーム配合剤のCFD値が、65%撓みで少なくとも0.75psi、65%撓みで少なくとも0.80psi、65%撓みで少なくとも0.85psi、65%撓みで少なくとも0.9psi、または65%撓みで少なくとも1psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、上記CFD値は、約2~2.6pcfの密度を有するフォーム組成物に関するものである。ある一定の実施形態において、上記CFD値は、約2.2~2.6pcfの密度、または約2.4pcfの密度を有するフォーム組成物に関するものである。ある一定の実施形態において、上記CFD値は、約2~2.6pcfの密度を有し、10%未満の充填ポリオール、5%未満の充填ポリオール、3%未満の充填ポリオール、2%未満の充填ポリオール、1%未満の充填ポリオールを含有することをさらに特徴とし、または充填ポリオールを実質的に含まないことを特徴とするフォームに関するものである。ある一定の実施形態において、上記フォーム配合剤は、座席用フォームに用いられるのに好適な快適特性を有することを特徴とする。

10

## 【0061】

ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤が、約4pcf未満の密度、及び25%撓みで少なくとも0.8psiのSTM D3574-08試験Cによって測定されるCFDの組み合わせを有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤のCFD値が、25%撓みで少なくとも0.85psi、25%撓みで少なくとも0.9psi、25%撓みで少なくとも0.95psi、または25%撓みで少なくとも1psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、ASTM D3574-08試験Cによって測定される約4pcf未満の密度を有する強化フォーム配合剤のCFD値が、50%撓みで少なくとも1psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、CFD値が50%撓みで少なくとも1.1psi、50%撓みで少なくとも1.2psi、50%撓みで少なくとも1.3psi、または50%撓みで少なくとも1.4psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、ASTM D3574-08試験Cによって測定される約4pcf未満の密度を有する強化フォーム配合剤のCFD値が、65%撓みで少なくとも1.4psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤のCFD値が65%撓みで少なくとも1.5psi、65%撓みで少なくとも1.6psi、65%撓みで少なくとも1.7psi、65%撓みで少なくとも1.8psi、65%撓みで少なくとも1.9psi、または65%撓みで少なくとも2psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、上記CFD値は、約3.2~3.8pcfの密度を有するフォーム組成物に関するものである。ある一定の実施形態において、上記CFD値は、約3.3~3.7pcfの密度、または約3.5pcfの密度を有するフォーム組成物に関するものである。ある一定の実施形態において、上記CFD値は、約3.2~3.8pcfの密度を有し、10%未満の充填ポリオール、5%未満の充填ポリオール、3%未満の充填ポリオール、2%未満の充填ポリオール、1%未満の充填ポリオールを含有することをさらに特徴とする、または充填ポリオールを実質的に含まないことを特徴とするフォームに関するものである。ある一定の実施形態において、上記フォーム配合剤は、座席用フォームに用いられるのに好適な快適特性を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明は、高強度ポリウレタンフォーム組成物（強化フォーム配合剤を示す）を処方する方法であって、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールをB側処方物に添加するステップを含み、ASTM D3574-08試験Eによって測定される強化フォームの引張強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）の引張強度よりも高いことを特徴とする方法を提供する。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォームに関してのB側処

20

30

40

50

方物の -OH 数が参照フォーム配合剤の B 側処方物のものと実質的に同じであるように、参照処方物において 1 つ以上のポリオールの一部を置換することによって、脂肪族ポリカーボネートポリオールを B 側処方物に添加することを含む。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の引張強度が、参照フォーム配合剤の引張強度より少なくとも 10 % 高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の引張強度が参照フォームの引張強度より少なくとも 20 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 %、少なくとも 50 %、または少なくとも 100 % 高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、強化フォーム及び参照フォームの引張強度は、これらが比較される前にフォームの密度に関して標準化される。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム組成物及び参照フォーム組成物が実質的に同じ密度を有することを特徴とする。

10

**【0062】**

ある一定の実施形態において、本発明は、高強度ポリウレタンフォーム組成物（強化フォーム配合剤を示す）を処方する方法であって、1 つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを B 側処方物に添加するステップを含み、強化フォーム配合剤が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）よりも低い密度を有することを特徴し、ASTM D 3574 - 08 試験 E によって求められる強化フォームの引張強度が、参照フォームのものと同じまたはこれより高いことをさらに特徴とする方法を提供する。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォームに関しての B 側処方物の -OH 数が参照フォーム配合剤の B 側処方物のものと実質的に同じであるように、参照処方物において 1 つ以上のポリオールの一部を置換することによって、脂肪族ポリカーボネートポリオールを B 側処方物に添加することを含む。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の密度が参照フォーム配合剤の密度より少なくとも 10 % 低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の密度が参照フォームの密度より少なくとも 10 %、少なくとも 20 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 %、または少なくとも 50 % 低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の密度が参照フォームの密度より少なくとも 10 %、少なくとも 20 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 %、または少なくとも 50 % 低い、強化フォームの引張強度は、参照フォームの引張強度と少なくとも等しい、これより少なくとも 10 % 高い、少なくとも 20 % 高い、少なくとも 30 % 高い、少なくとも 40 % 高い、少なくとも 50 % 高い、少なくとも 75 % 高い、または少なくとも 100 % 高いことを特徴とする。

20

30

**【0063】**

ある一定の実施形態において、本発明は、高強度ポリウレタンフォーム組成物（強化フォーム配合剤を示す）を処方する方法であって、1 つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを B 側処方物に添加するステップを含み、ASTM D 3574 - 08 試験 F によって測定される強化フォームの引裂強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）の引裂強度より高いことを特徴とする方法を提供する。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォームに関しての B 側処方物の -OH 数が参照フォーム配合剤の B 側処方物のものと実質的に同じであるように、参照処方物において 1 つ以上のポリオールの一部を置換することによって、脂肪族ポリカーボネートポリオールを B 側処方物に添加することを含む。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の引張強度が参照フォーム配合剤の引張強度より少なくとも 10 % 高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の引裂強度が参照フォームの引裂強度より少なくとも 20 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 %、少なくとも 50 %、または少なくとも 100 % 高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、強化フォーム及び参照フォームの引裂強度は、これらが比較される前にフォームの密度に関して標準化される。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フ

40

50

フォーム組成物及び参照フォーム組成物が実質的に同じ密度を有することを特徴とする。

【0064】

ある一定の実施形態において、本発明は、高強度ポリウレタンフォーム組成物（強化フォーム配合剤を示す）を処方する方法であって、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールをB側処方物に添加するステップを含み、強化フォーム配合剤が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）よりも低い密度を有することを特徴とし、ASTM D3574-08試験Fによって求められる強化フォームの引裂強度が参照フォームのものに等しいまたはこれより高いことをさらに特徴とする方法を提供する。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものであり、参照処方物において1つ以上のポリオールの一部を置換することによって、脂肪族ポリカーボネートポリオールをB側処方物に添加することを含む。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の密度が参照フォーム配合剤の密度より少なくとも10%低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の密度が参照フォームの密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%、または少なくとも50%低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤の密度が参照フォームの密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%、または少なくとも50%低い、強化フォームの引裂強度は、参照フォームの引裂強度と少なくとも等しい、これより少なくとも10%高い、少なくとも20%高い、少なくとも30%高い、少なくとも40%高い、少なくとも50%高い、少なくとも75%高い、または少なくとも100%高いことを特徴とする。

10

20

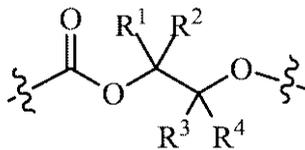
【0065】

ある一定の実施形態において、上記方法によって作製される強化フォーム組成物は、軟質ポリウレタンフォームを含む。ある一定の実施形態において、上記方法によって作製される強化フォーム組成物は、粘弾性ポリウレタンフォームを含む。ある一定の実施形態において、上記方法によって作製される強化フォーム組成物は、硬質ポリウレタンフォームを含む。

【0066】

ある一定の実施形態において、上記方法において利用されるポリカーボネートポリオールは、構造：

【化4】



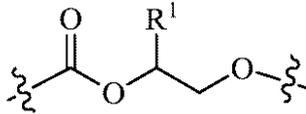
式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、-H、フッ素、場合により置換されている $C_{1-40}$ 脂肪族基、場合により置換されている $C_{1-20}$ ヘテロ脂肪族基、及び場合により置換されているアリール基からなる群から独立して選択され、ここで、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ のいずれか2つ以上が、場合により介在原子と一緒にあって、1つ以上のヘテロ原子を場合により含有する1つ以上の場合により置換されている環を形成してよい；を有する第1の繰り返し単位を有する。

40

【0067】

ある一定の実施形態において、上記方法において利用されるポリカーボネートポリオールは、構造：

## 【化5】

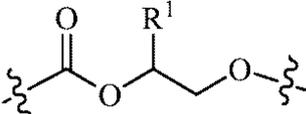


式中、 $R^1$  は、先に定義されている通りである；を有する第1の繰り返し単位を含有する。

## 【0068】

ある一定の実施形態において、上記方法において利用されるポリカーボネートポリオールは、構造：

## 【化6】



式中、 $R^1$  は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、独立して、 $-H$ 、または $-CH_3$ である；を有する第1の繰り返し単位を含有する。

## 【0069】

ある一定の実施形態において、上記方法において利用されるポリカーボネートポリオールは、約 $500\text{ g/mol}$ ～約 $20,000\text{ g/mol}$ の数平均分子量( $M_n$ )を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、約 $1,000\text{ g/mol}$ ～約 $5,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、約 $1,000\text{ g/mol}$ ～約 $3,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、約 $1,000\text{ g/mol}$ 、約 $1,200\text{ g/mol}$ 、約 $1,500\text{ g/mol}$ 、約 $2,000\text{ g/mol}$ 、約 $2,500\text{ g/mol}$ または約 $3,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有することを特徴とする。

## 【0070】

ある一定の実施形態において、上記方法において利用されるポリカーボネートポリオールは、高い百分率の、イソシアネートに対して反応性の末端基を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、鎖端の $98\%$ 超、 $99\%$ 超、 $99.5\%$ 超、 $99.8\%$ 超、 $99.9\%$ 超、または本質的に $100\%$ が、イソシアネートに対して反応性の基である。ある一定の実施形態において、イソシアネートに対して反応性の鎖端は、 $-OH$ 基を含む。

## 【0071】

ある一定の実施形態において、上記方法において利用される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、フォーム配合剤のポリオール成分中に存在する他のポリオールと実質的に相溶性またはこれに可溶性であることを特徴とする。この文脈における実質的に相溶性とは、脂肪族ポリカーボネートが、他のポリオールまたはポリオール類と混合され得、均一またはほぼ均一である混合物を付与することができることを意味する。ある一定の実施形態において、混合物は、周囲温度で高度に均一である一方で、他の実施形態において、混合物は、高温で均一である(例えば、混合物は、 $30^\circ\text{C}$ で、 $40^\circ\text{C}$ で、 $80^\circ\text{C}$ で、 $100^\circ\text{C}$ でまたは $140^\circ\text{C}$ で均一である)。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールを含有するフォーム配合剤のポリオール成分は、実質的に均一な透明な混合物であることを特徴とする。

## 【0072】

ある一定の実施形態において、上記方法において用いられる脂肪族ポリカーボネートポリオールの構造は、該ポリオールと、フォーム配合剤のポリオール成分中の他のポリオールとの相溶性を向上させるように選択される。ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリカーボネート鎖内に埋め込まれた連鎖移動剤

10

20

30

40

50

に存在する1つ以上のエーテル連結を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、かかるエーテル連結は、脂肪族ポリカーボネートポリオール調製の連鎖移動剤としてのジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、またはポリエチレン-コ-プロピレングリコールの使用に由来する。ある一定の実施形態において、かかるエーテル連結は、エトキシ化またはプロポキシ化ジオール、トリオール、または4つ以上の-OH基を有する、これより多価のアルコールを利用することによって付与される。ある一定の実施形態において、かかるエーテル連結は、連鎖移動剤としてイソソルビドまたは他の炭水化物誘導材料を利用することによって付与される。

10

## 【0073】

ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、2の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、2超の官能数を有する。ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、2~4の官能数を有する。ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、2~3の官能数を有する。ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、2~約2.6、2~約2.5、または2~約2.4の官能数を有する。ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ジオール(官能数2)と、より高い官能性のポリオール(例えば、3、4、5、または6の官能数を有するポリオール)との混合物を含むことを特徴とする。

20

## 【0074】

ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、約10,000g/mol未満の数平均分子量(Mn)を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、400~約10,000g/molのMnを有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、400~約5,000g/mol、500~約3,000g/mol、700~約2,500g/mol、1,000~3,000g/mol、または700~1500g/molのMnを有することを特徴とする。

## 【0075】

ある一定の実施形態において、付与される脂肪族ポリカーボネートポリオールは、10,000g/mol未満のMn及び2~4の官能数を有しかつポリカーボネート鎖内に埋め込まれた連鎖移動剤中に存在する1つ以上のエーテル連結を有する、二酸化炭素ならびにエチレンオキシド及びプロピレンオキシドの一方または両方のコポリマーを含むことを特徴とする。ある一定の実施形態において、付与されるポリカーボネートポリオールは、5,000g/mol未満のMn及び2~3の官能数を有することを特徴とし、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシ化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある一定の実施形態において、付与されるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシ化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(プロピレン

30

40

50

カーボネート)を含み、 $500 \sim 2,500 \text{ g/mol}$ のMn及び2~2.5の官能数を有することを特徴とする。

【0076】

ある一定の実施形態において、付与されるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(エチレンカーボネート)を含み、 $5,000 \text{ g/mol}$ 未満のMn及び2~3の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、付与されるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(エチレンカーボネート)を含み、 $3,000 \text{ g/mol}$ 未満のMn及び2~2.5の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、付与されるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(エチレン-コ-プロピレンカーボネート)を含み、 $5,000 \text{ g/mol}$ 未満のMn及び2~3の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、付与されるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(エチレン-コ-プロピレンカーボネート)を含み、 $3,000 \text{ g/mol}$ 未満のMn及び2~2.5の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、付与されるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(エチレン-コ-プロピレンカーボネート)を含み、 $500 \sim 2,500 \text{ g/mol}$ のMn及び2~2.5の官能数を有することを特徴とする。

【0077】

本発明の方法に有用性を有するさらなる脂肪族ポリカーボネートポリオールの構造及び特性は、タイトル「脂肪族ポリカーボネートポリオール」の、本明細書の終わりにある別表Aに記載されている。ある一定の実施形態において、本発明は、上記方法のいずれをも包含し、添加されるポリカーボネートポリオールは、別表Aに記載のもののうち任意の1つ以上から選択される。

【0078】

ある一定の実施形態において、本発明の方法は、上記の脂肪族ポリカーボネートポリオールを含有するB側混合物のいずれかを、1つ以上のポリイソシアネートを含むA側処方物と反応させるさらなるステップを含む。

【0079】

ポリウレタン合成の技術は、かなり進んでおり、非常に多数のイソシアネート及び関係

10

20

30

40

50

するポリウレタン前駆体が当該分野において公知であり、商業的に入手可能である。かかるイソシアネートを本開示の教示に沿って用いて、方法を本発明の範囲内で実施することは、ポリウレタン処方物の当業者の能力の範囲内であることが理解されるべきである。好適なイソシアネート化合物及び関係する方法の記載は、各々の全体が参照により本明細書に組み込まれるChemistry and Technology of Polyols for Polyurethanes Ionescu, Mihail 2005 (ISBN 978-1-84735-035-0), and H. Ulrich, "Urethane Polymers"

Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 1997に見出され得る。ある一定の実施形態において、A側処方物は、本明細書の終わりに見られるタイトル「イソシアネート試薬」の別表Bに記載されているイソシアネート試薬の1つ以上を含有する。

【0080】

上記方法の代替として、本発明に包含される別の方策は、脂肪族ポリカーボネートポリオールを、B側ポリオール混合物にではなく、フォームのA側イソシアネート成分の一部として組み込むことによって、フォーム配合剤に組み込むことを含む。この方策は、上記と同じ強度向上利益を生じさせることができる。本発明のこの変更は、エポキシドCO<sub>2</sub>コポリマー性ポリオールからイソシアネート末端プレポリマーを製造する公知の方法を利用し、これらのイソシアネート末端材料を、強化されていない参照処方物において用いられるポリイソシアネートの一部のために、フォーム配合剤のA側成分に添加することによって達成され得る。ポリオールをモル過剰のジイソシアネートと反応させることによってポリオールをイソシアネート末端プレポリマーに変換する方法は、当該分野において周知である。

【0081】

ある一定の実施形態において、本発明の方法は、ポリウレタンフォーム組成物のポリイソシアネート成分に、CO<sub>2</sub>及び1つ以上のエポキシドの共重合から誘導されるイソシアネート末端脂肪族ポリカーボネートポリオールを含む強度向上添加剤を付与するステップを含む。したがって、本発明は、高強度ポリウレタンフォーム組成物の生成に関しての上記変更及び実施形態の全てを包含するが、フォームを強化するステップが、以下のサブステップを含むという点において改変される：

- a) CO<sub>2</sub>及び1つ以上のエポキシドのコポリマーを含むポリカーボネートポリオールを、過剰のポリイソシアネート（またはその反応性等価物）と反応させて、イソシアネート末端ポリカーボネートポリオールを付与するサブステップ、ならびに
- b) イソシアネート末端ポリカーボネートポリオールをフォーム組成物のイソシアネート成分に添加するサブステップ。

【0082】

完成したフォームを処方するのに必要なさらなるステップを含む上記方法のさらなる変更は、当業者に容易に明らかである。したがって、本明細書にはこれらが記載されていないが、フォーム配合剤の典型的なさらなるステップを含む方法が、本発明によって具体的に包含される。かかるさらなるステップとして、限定されないが：

さらなる成分をA-及び/またはB側処方物（例えば、触媒、発泡剤、顔料、安定剤、難燃剤、セルオープナー、界面活性剤、反応性希釈剤、抗菌剤など）に添加すること；

A側及びB側成分を加熱、冷却、混合または合わせること；ならびに

フォーム配合剤を成形、押出、発泡、噴霧、加熱、硬化、エージングまたは他の場合には処理すること；

を挙げることができる。

【0083】

II. 高強度ポリウレタンフォーム組成物

別の態様において、本発明は、高強度ポリウレタンフォーム組成物を包含する。ある一定の実施形態において、本発明組成物は、所定の密度において向上された強度、または良好な快適特性と組み合わせたより高い圧縮力撓みを含む、予想外の特性の組み合わせを有する。これらのフォーム組成物は、フォーム産業において満たされていない要件を満足させており、該組成物が、高強度または良好な摩耗特性が低密度または低コストフォームへ

10

20

30

40

50

の所望と現在において比較検討される必要がある用途において大きな価値を有すると予想される。

【0084】

ある一定の実施形態において、本発明は、ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含むポリウレタンフォーム組成物であって、ポリオール成分が、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含む、組成物を提供する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約1重量%～約50重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、フォーム組成物は、耐荷重特性がポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するフォームよりも高いことを特徴とする。

10

【0085】

ある一定の実施形態において、本発明のフォーム組成物は、ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含み、ポリオール成分が、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含有する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、フォーム配合剤のポリオール成分中に存在する全ポリオールの約1重量%～約50重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、フォーム配合剤のポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約50重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約5重量%～約25重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約1重量%～約2重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約5重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約10重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約5重量%～約10重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約10重量%～約20重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約20重量%～約30重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約30重量%～約50重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約1重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約1重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約3重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約5重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約10重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約15重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約20重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約25重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約30重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約40重量%の量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約50

20

30

40

50

重量%の量で存在する。

【0086】

ある一定の実施形態において、ポリオール成分中に存在する他のポリオール（すなわち、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオール以外のポリオール）は、ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、ポリブタジエンポリオール、ポリスルフィドポリオール、天然油ポリオール、フッ化ポリオール、脂肪族ポリオール、エポキシド - CO<sub>2</sub> 共重合から誘導される以外のポリカーボネートポリオール、ならびに任意の2種以上のこれらの混合物からなる群から選択される。ある一定の実施形態において、ポリオール成分中に存在するポリオール（すなわち、フォームのためのB側組成物中に存在してよい任意の他の非ポリオール成分、例えば、触媒、セルオープンナー、発泡剤、安定剤、希釈剤などを除く）の全重量の約50%～約99%が、ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、ポリブタジエンポリオール、ポリスルフィドポリオール、天然油ポリオール、フッ化ポリオール、脂肪族ポリオール、エポキシド - CO<sub>2</sub> 共重合から誘導される以外のポリカーボネートポリオール、ならびに任意の2種以上のこれらの混合物からなる群から選択される1つ以上のポリオールを含む。ある一定の実施形態において、ポリオール成分中に存在する他のポリオールは、ポリエーテルポリオールを実質的に含む。ある一定の実施形態において、ポリオール成分中に存在する他のポリオールは、ポリエステルポリオールを実質的に含む。ある一定の実施形態において、ポリオール成分中に存在する他のポリオールは、ポリエーテル及びポリエステルポリオールの混合物を実質的に含む。

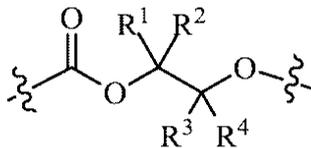
10

20

【0087】

ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、構造：

【化7】



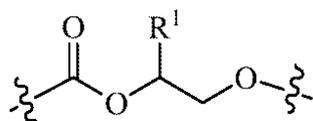
式中、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、及びR<sup>4</sup>は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、-H、フッ素、場合により置換されているC<sub>1</sub>-<sub>40</sub>脂肪族基、場合により置換されているC<sub>1</sub>-<sub>20</sub>ヘテロ脂肪族基、及び場合により置換されているアリール基からなる群から独立して選択され、ここで、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、及びR<sup>4</sup>のうちいずれか2つ以上が、介在原子と一緒にあって、1つ以上のヘテロ原子を場合により含有する1つ以上の場合により置換されている環を形成してよい；を有する第1の繰り返し単位を有するポリオールを含む。

30

【0088】

ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、構造：

【化8】



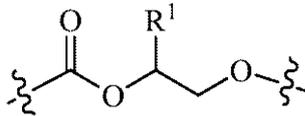
式中、R<sup>1</sup>は、先に定義されている通りである；を有する第1の繰り返し単位を有するポリオールを含む。

40

【0089】

ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、構造：

## 【化9】



式中、 $R^1$  は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、独立して、 $-H$ 、または $-CH_3$ である；を有する第1の繰り返し単位を有するポリオールを含む。

## 【0090】

ある一定の実施形態において、上記高強度フォーム組成物は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールが、約 $500\text{ g/mol}$ ～約 $20,000\text{ g/mol}$ の数平均分子量( $M_n$ )を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、約 $1,000\text{ g/mol}$ ～約 $5,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、約 $1,000\text{ g/mol}$ ～約 $3,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、約 $1,000\text{ g/mol}$ 、約 $1,200\text{ g/mol}$ 、約 $1,500\text{ g/mol}$ 、約 $2,000\text{ g/mol}$ 、約 $2,500\text{ g/mol}$ または約 $3,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有する。

10

## 【0091】

ある一定の実施形態において、上記高強度フォーム組成物は、添加剤として組み込まれたポリカーボネートポリオールが、高い百分率の、末端イソシアネートに対して反応性の基を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオール鎖端の $98\%$ 超、 $99\%$ 超、 $99.5\%$ 超、 $99.8\%$ 超、 $99.9\%$ 超、または本質的に $100\%$ が、イソシアネートに対して反応性の基である。ある一定の実施形態において、イソシアネートに対して反応性の鎖端は、 $-OH$ 基を含む。

20

## 【0092】

ある一定の実施形態において、上記高強度フォーム組成物は、添加剤として組み込まれたポリカーボネートポリオールが、フォーム配合剤のポリオール成分に存在する他のポリオールに実質的に相溶性または可溶性であることを特徴とする。この文脈における実質的に相溶性とは、脂肪族ポリカーボネートが他のポリオールまたはポリオール類と混合され得、均一またはほぼ均一である混合物を付与することを意味する。ある一定の実施形態において、混合物は、周囲温度で高度に均一である一方で、他の実施形態において、混合物は、高温で均一である(例えば、混合物は、 $30^\circ\text{C}$ で、 $40^\circ\text{C}$ で、 $80^\circ\text{C}$ で、 $100^\circ\text{C}$ でまたは $140^\circ\text{C}$ で均一である)。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールを含有するフォーム配合剤のポリオール成分は、実質的に均一な透明な混合物である。

30

## 【0093】

ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、組み込まれる脂肪族ポリカーボネートポリオールの構造が、フォーム配合剤のポリオール成分中の他のポリオールとの相溶性を向上させるように選択されることを特徴とする。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリカーボネート鎖内に埋め込まれた連鎖移動剤中に存在する1つ以上のエーテル連結を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、かかるエーテル連結は、脂肪族ポリカーボネートポリオールの調製における連鎖移動剤としてジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、またはポリエチレン-コ-プロピレングリコールの使用に由来する。ある一定の実施形態において、かかるエーテル連結は、エトキシ化またはプロポキシ化ジオール、トリオール、または4つ以上の $-OH$ 基を有する、これより多価のアルコールを利用することによって付与される。ある一定の実施形態において、かかるエーテル連結は、イソソルビドまたは他の炭水化物誘導材料を連鎖移動剤として利用することによって付

40

50

与される。

【0094】

ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、該組成物において用いられる脂肪族ポリカーボネートポリオールが、2または約2の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、2超の官能数を有する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、2～4の官能数を有する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、2～3の官能数を有する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、2～約2.6、2～約2.5、または2～約2.4の官能数を有する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ジオール（官能数2）と、1つ以上のより高い官能性のポリオール（例えば、3、4、5、または6の官能数を有するポリオール）との混合物を含むことを特徴とする。

10

【0095】

ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、約10,000g/mol未満の数平均分子量(Mn)を有する脂肪族ポリカーボネートポリオールを組み込むことを特徴とする。ある一定の実施形態において、組み込まれる脂肪族ポリカーボネートポリオールは、400～約10,000g/molのMnを有する。ある一定の実施形態において、組み込まれる脂肪族ポリカーボネートポリオールは、400～約5,000g/mol、500～約3,000g/mol、700～約2,500g/mol、1,000～3,000g/mol、または700～1500g/molのMnを有することを特徴とする。

20

【0096】

ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、10,000g/mol未満のMn及び2～4の官能数を有し、かつポリカーボネート鎖内に埋め込まれた連鎖移動剤中に存在する1つ以上のエーテル連結を有する、二酸化炭素ならびにエチレンオキシド及びプロピレンオキシドの一方または両方のコポリマーを組み込むことを特徴とする。ある一定の実施形態において、組み込まれるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ（プロピレンカーボネート）を含み、5,000g/mol未満のMn及び2～3の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、組み込まれるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ（プロピレンカーボネート）を含み、3,000g/mol未満のMn及び2～2.5の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、組み込まれるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ（プロピレンカーボネート）を含み、500～2,500g/molのMn及び2～2.5の官能数を有することを特徴とする。

30

40

【0097】

ある一定の実施形態において、組み込まれるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ（エチレンカーボネート）を含み、5,000g/mol

50

1未満の $M_n$ 及び2～3の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、組み込まれるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(エチレンカーボネート)を含み、3,000g/mol未満の $M_n$ 及び2～2.5の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、組み込まれるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(エチレンカーボネート)を含み、500～2,500g/molの $M_n$ 及び2～2.5の官能数を有することを特徴とする。

10

## 【0098】

ある一定の実施形態において、付与されるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(エチレン-コ-プロピレンカーボネート)を含み、5,000g/mol未満の $M_n$ 及び2～3の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、組み込まれるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(エチレン-コ-プロピレンカーボネート)を含み、3,000g/mol未満の $M_n$ 及び2～2.5の官能数を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、組み込まれるポリカーボネートポリオールは、ジエチレングリコール、ジプロピレングリコール、トリエチレングリコール、トリプロピレングリコール、高級ポリエチレングリコール、高級ポリプロピレングリコール、ポリエチレン-コ-プロピレングリコール、またはアルコキシル化多価アルコールから誘導される埋め込まれた連鎖移動剤を含有するポリ(エチレン-コ-プロピレンカーボネート)を含み、500～2,500g/molの $M_n$ 及び2～2.5の官能数を有することを特徴とする。

20

30

## 【0099】

本発明の高強度フォーム組成物において組み込まれていてよい脂肪族ポリカーボネートポリオールの構造及び特性は、タイトル「脂肪族ポリカーボネートポリオール」の、本明細書の終わりにある別表Aにより完全に記載されている。ある一定の実施形態において、本発明は、上記フォーム配合剤のいずれをも包含し、処方物において用いられるポリカーボネートポリオールは、別表Aに記載のもののうち任意の1つ以上から選択される。

## 【0100】

本発明の高強度フォーム組成物は、上記脂肪族ポリカーボネートポリオールを含有するB側混合物のいずれかと1つ以上のポリイソシアネートを含むA側処方物との反応生成物を含む。ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、MDI系ポリウレタンフォームを含む。ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、TDI系ポリウレタンフォームを含む。

40

## 【0101】

ポリウレタン合成の技術は、かなり進んでおり、非常に多数のイソシアネート及び関係するポリウレタン前駆体が当該分野において公知であり、商業的に入手可能である。かかるイソシアネートを本開示の教示に沿って選択して用いて、本発明の範囲内の高強度フォームを製造することは、ポリウレタン処方物の当業者の能力の範囲内であることが理解されるべきである。好適なイソシアネート化合物及び類縁物の記載は、各々の全体が参照に

50

より本明細書に組み込まれるChemistry and Technology of Polyols for Polyurethanes Ionescu, Mihail 2005 (ISBN 978-1-84735-035-0), and H. Ulrich, "Urethane Polymers" Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 1997に見出され得る。ある一定の実施形態において、本発明フォームは、上記ポリオール処方物のいずれかと、本明細書の終わりに見られるタイトル「イソシアネート試薬」の別表Bに記載されているイソシアネート試薬の1つ以上を含有するA側処方物との反応生成物を含む。

【0102】

ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、軟質ポリウレタンフォームを含む。ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、粘弾性ポリウレタンフォームを含む。ある一定の実施形態において、本発明の高強度フォーム組成物は、硬質ポリウレタンフォームを含む。

10

【0103】

ある一定の実施形態において、上記本発明高強度フォームは、軟質フォーム組成物を含む。ある一定の実施形態において、上記本発明高強度フォームは、高弾力軟質フォーム組成物を含む。ある一定の実施形態において、本発明は、かかる軟質フォーム組成物から製造される物品を提供する。かかる物品として、限定されないが：スラブストックフォーム、住居及びオフィス使用のための座席クッション、マットレス、個人用防具、運動用器材、オフィス家具、輸送座席、自動車の内装部品及び表面、例えば、ダッシュボード、ドアパネル、ヘッドライナーなどが挙げられる。

20

【0104】

A. 軟質フォーム組成物

ある一定の実施形態において、本発明の組成物は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールと組み合わせられたポリエーテルポリオールを含むB側組成物から誘導される高強度軟質ポリウレタンフォーム組成物を含む。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、最終のB側組成物が100部のポリエーテルポリオールを基準にして約1重量部～約100重量部のポリカーボネートポリオールを含有するような量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリカーボネートポリオールが、得られるB側処方物において100部のポリエーテルポリオールを基準にして約5部、約10部、約20部、約30部、約40部、約60部、約80部、または約100部を含むような量で存在する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある一定の実施形態において、当該脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリ(エチレンカーボネート)を含む。ある一定の実施形態において、当該脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリ(エチレン-コ-プロピレンカーボネート)を含む。

30

【0105】

ある一定の実施形態において、本発明の高強度軟質フォーム組成物は、フォームがポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するフォームよりも高い強度を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明フォームは、破断点引張強度(ASTM D3574-08試験Eによって測定される)；引裂強度(ASTM D3574-08試験Fによって測定される)；圧縮力撓み(CFD)(ASTM D3574-08試験Cによって測定される)；ならびに(ASTM D3574-08試験Kによって測定される)140 22時間の乾熱エージング後の引張強度及び伸びからなる群から選択される1つ以上の特性が、ポリカーボネートポリオール添加剤を用いずに処方される対応する参照フォームのものと比較して向上されることを特徴とする。

40

【0106】

ある一定の実施形態において、本発明は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含み、強化フォームの、ASTM D3574-08試験Cによって測定されるその圧縮力撓み(CFD)値によって示される荷重負担能力が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するフォーム組成物(参照フォーム配合剤を示す)のCFD値よりも大きいことを特徴とする高

50

強度軟質ポリウレタンフォーム組成物（強化フォーム配合剤を示す）を提供する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、参照において1つ以上のポリオールの一部の代わりにB側処方物中に存在する。好ましくは、このことは、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるように達成される。ある一定の実施形態において、本発明高強度フォームは、強化フォームのCFD値が、参照フォーム配合剤のCFD値より少なくとも10%大きいことを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度フォームは、強化フォームのCFD値が、参照フォームのCFD値より少なくとも10%大きい、少なくとも20%大きい、少なくとも30%大きい、少なくとも40%大きい、少なくとも50%大きい、または少なくとも100%大きいことを特徴とする。ある一定の実施形態において、強化フォーム及び参照フォームのCFD値は、これらが比較される前にフォームの密度に関して標準化される。ある一定の実施形態において、本発明のフォーム組成物は、比較される参照フォーム組成物と同じ密度を実質的に有することを特徴とする。

10

## 【0107】

ある一定の実施形態において、本発明は、添加剤を含有する高強度軟質ポリウレタンフォーム組成物（強化フォーム配合剤を示す）であって、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含み、強化フォーム配合剤が、添加剤を用いずに処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）よりも低い密度を有することを特徴とし、ASTM D3574-08試験Cによって求められる強化フォームの耐荷重特性（CFD）が参照フォームのものと等しいまたはこれより大きいことをさらに特徴とする高強度軟質ポリウレタンフォーム組成物を提供する。ある一定の実施形態において、組成物は、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるように参照処方物において1つ以上のポリオールの一部を置換することによってフォームが生成されるB側処方物に添加剤が付与されることを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明ポリウレタンフォーム組成物は、強化フォーム配合剤の密度が参照フォーム配合剤の密度より少なくとも10%低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明強度ポリウレタンフォーム組成物は、強化フォーム配合剤の密度が、参照フォームの密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%、または少なくとも50%低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明フォーム組成物は、密度が、参照フォームの密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%、または少なくとも50%低い一方で、強化フォームのCFDは、参照フォームのCFDに少なくとも等しい、これより少なくとも10%大きい、少なくとも20%大きい、少なくとも30%大きい、少なくとも40%大きい、少なくとも50%大きい、少なくとも75%大きい、または少なくとも100%大きいことを特徴とする。

20

30

## 【0108】

ある一定の実施形態において、本発明は、約2.6ポンド/立方フィート（pcf）未満の密度及び25%撓みで少なくとも0.4psiのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFDの組み合わせを有する高強度軟質TDI系ポリウレタンフォーム組成物を提供する。ある一定の実施形態において、該方法は、CFD値が、25%撓みで少なくとも0.45psi、25%撓みで少なくとも0.5psi、または25%撓みで少なくとも0.52psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度軟質TDI系ポリウレタンフォームは、フォームのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFD値が、50%撓みで少なくとも0.5psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度軟質TDI系ポリウレタンフォームは、強化フォームのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFD値が、50%撓みで少なくとも0.55psi、50%撓みで少なくとも0.60psi、50%撓みで少なくとも0.65psi、50%撓みで少なくとも0.7psi、または50%撓みで少なくとも0.75psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度軟質TDI系ポリウレタンフォームは、フォームのASTM D3574-08試

40

50

験Cによって測定されるCFD値が、65%撓みで少なくとも0.7psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度軟質TDI系ポリウレタンフォームは、強化フォームのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFD値が、65%撓みで少なくとも0.75psi、65%撓みで少なくとも0.80psi、65%撓みで少なくとも0.85psi、65%撓みで少なくとも0.9psi、または65%撓みで少なくとも1psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、上記CFD値は、約2~2.6pcfの密度を有するフォーム組成物に関するものである。ある一定の実施形態において、高強度軟質TDI系ポリウレタンフォームは、約2.2~2.6pcfの密度、または約2.4pcfの密度を有する。ある一定の実施形態において、高強度軟質TDI系ポリウレタンフォームは、約2~2.6pcfの密度を有しており、10%未満の充填ポリオール、5%未満の充填ポリオール、3%未満の充填ポリオール、2%未満の充填ポリオール、1%未満の充填ポリオールを含有することをさらに特徴とし、または充填ポリオールを実質的に含まないことを特徴とする。ある一定の実施形態において、上記フォーム配合剤は、座席用フォームに用いられるのに好適な快適特性を有することを特徴とする。

10

## 【0109】

ある一定の実施形態において、本発明は、約4pcf未満の密度及び25%撓みで少なくとも0.8psiのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFDの組み合わせを有する高強度軟質TDI系ポリウレタンフォーム組成物を提供する。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤のCFD値が、25%撓みで少なくとも0.85psi、25%撓みで少なくとも0.9psi、25%撓みで少なくとも0.95psi、または25%撓みで少なくとも1psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、ASTM D3574-08試験Cによって測定される、約4pcf未満の密度を有する強化フォームのCFD値が、50%撓みで少なくとも1psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度フォーム組成物は、CFD値が、50%撓みで少なくとも1.1psi、50%撓みで少なくとも1.15psi、50%撓みで少なくとも1.2psi、50%撓みで少なくとも1.3psi、または50%撓みで少なくとも1.4psiであることを特徴とする。

20

## 【0110】

ある一定の実施形態において、高強度TDI系フォーム組成物は、該フォームが、約4pcf未満の密度及び65%撓みで少なくとも1.4psiのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFDの組み合わせを有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度フォーム組成物は、フォームのCFD値が、65%撓みで少なくとも1.5psi、65%撓みで少なくとも1.6psi、65%撓みで少なくとも1.7psi、65%撓みで少なくとも1.8psi、65%撓みで少なくとも1.9psi、または65%撓みで少なくとも2psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度TDI系フォーム組成物は、約3.2~3.8pcfの密度を有する。ある一定の実施形態において、高強度TDI系フォーム組成物は、約3.3~3.7pcfの密度、または約3.5pcfの密度を有する。ある一定の実施形態において、高強度TDI系フォーム組成物は、約3.2~3.8pcfの密度を有しており、10%未満の充填ポリオール、5%未満の充填ポリオール、3%未満の充填ポリオール、2%未満の充填ポリオール、1%未満の充填ポリオールを含有することをさらに特徴とし、または充填ポリオールを実質的に含まないことを特徴とする。ある一定の実施形態において、上記フォーム配合剤は、座席用フォームに用いられるのに好適な快適特性を有することを特徴とする。

30

40

## 【0111】

ある一定の実施形態において、本発明は、約2.5ポンド/立方フィート(pcf)未満の密度及び25%撓みで少なくとも0.35psiのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFDの組み合わせを有する高強度軟質MDI系ポリウレタンフォーム組成物を提供する。ある一定の実施形態において、該方法は、CFD値が、25%撓

50

みで少なくとも0.4 psi、25%撓みで少なくとも0.45 psi、または25%撓みで少なくとも0.5 psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度軟質MDI系ポリウレタンフォームは、ASTM D3574-08試験Cによって測定されるフォームのCFD値が、50%撓みで少なくとも0.4 psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度軟質MDI系ポリウレタンフォームは、強化フォームのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFD値が、50%撓みで少なくとも0.45 psi、50%撓みで少なくとも0.50 psi、50%撓みで少なくとも0.55 psi、50%撓みで少なくとも0.6 psi、または50%撓みで少なくとも0.65 psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度軟質MDI系ポリウレタンフォームは、ASTM D3574-08試験Cによつて測定されるフォームのCFD値が、65%撓みで少なくとも0.7 psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度軟質MDI系ポリウレタンフォームは、ASTM D3574-08試験Cによって測定される強化フォームのCFD値が、65%撓みで少なくとも0.75 psi、65%撓みで少なくとも0.80 psi、65%撓みで少なくとも0.85 psi、65%撓みで少なくとも0.9 psi、または65%撓みで少なくとも1 psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度MDI系フォームは、約2~2.6 pcfの密度を有する。ある一定の実施形態において、高強度MDI系フォームは、約2.2~2.6 pcfの密度、または約2.4 pcfの密度を有する。ある一定の実施形態において、高強度MDI系フォームは、約2~2.6 pcfの密度を有しており、10%未満の充填ポリオール、5%未満の充填ポリオール、3%未満の充填ポリオール、2%未満の充填ポリオール、1%未満の充填ポリオールを含有することをさらに特徴とし、または充填ポリオールを実質的に含まないことを特徴とする。ある一定の実施形態において、上記フォーム配合剤は、座席用フォームに用いられるのに好適な快適特性を有することを特徴とする。

#### 【0112】

ある一定の実施形態において、本発明は、約4 pcf未満の密度及び25%撓みで少なくとも0.8 psiのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFDの組み合わせを有する高強度軟質MDI系ポリウレタンフォーム組成物を提供する。ある一定の実施形態において、該方法は、強化フォーム配合剤のCFD値が、25%撓みで少なくとも0.85 psi、25%撓みで少なくとも0.9 psi、25%撓みで少なくとも0.95 psi、または25%撓みで少なくとも1 psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、該方法は、ASTM D3574-08試験Cによって測定される約4 pcf未満の密度を有する強化フォームのCFD値が、50%撓みで少なくとも1 psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度フォーム組成物は、CFD値が、50%撓みで少なくとも1.1 psi、50%撓みで少なくとも1.2 psi、50%撓みで少なくとも1.4 psi、50%撓みで少なくとも1.5 psi、または50%撓みで少なくとも1.8 psiであることを特徴とする。

#### 【0113】

ある一定の実施形態において、高強度MDI系フォーム組成物は、該フォームが、約4 pcf未満の密度及び65%撓みで少なくとも1.4 psiのASTM D3574-08試験Cによって測定されるCFDの組み合わせを有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度フォーム組成物は、フォームのCFD値が、65%撓みで少なくとも1.5 psi、65%撓みで少なくとも1.6 psi、65%撓みで少なくとも1.7 psi、65%撓みで少なくとも1.8 psi、65%撓みで少なくとも1.9 psi、65%撓みで少なくとも2 psi、または65%撓みで少なくとも3 psiであることを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度MDI系フォーム組成物は、約3.2~3.8 pcfの密度を有する。ある一定の実施形態において、高強度MDI系フォーム組成物は、約3.3~3.7 pcfの密度、または約3.5 pcfの密度を有する。ある一定の実施形態において、高強度MDI系フォーム組成物は、約3.2~3.8 pcfの密度を有しており、10%未満の充填ポリオール、5%未満の充填ポリオール、3%

10

20

30

40

50

未満の充填ポリオール、2%未満の充填ポリオール、1%未満の充填ポリオールを含有することをさらに特徴とし、または充填ポリオールを実質的に含まないことを特徴とする。ある一定の実施形態において、上記フォーム配合剤は、座席用フォームに用いられるのに好適な快適特性を有することを特徴とする。

#### 【0114】

ある一定の実施形態において、本発明は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含む添加剤を含有する高強度軟質ポリウレタンフォーム組成物（強化フォーム配合剤を示す）を提供し、ASTM D 3574 - 08 試験Eによって測定される強化フォームの引張強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）の引張強度より高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、参照における1つ以上のポリオールの一部の代わりにB側処方物に存在する。好ましくは、このことは、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるときに達成される。ある一定の実施形態において、本発明高強度フォームは、強化フォームの引張強度が、参照フォーム配合剤の引張強度より少なくとも10%高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度フォームは、強化フォームの引張強度が、参照フォームの引張強度より少なくとも10%高い、少なくとも20%高い、少なくとも30%高い、少なくとも40%高い、少なくとも50%高い、または少なくとも100%高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、強化フォーム及び参照フォームの引張強度は、これらが比較される前にフォームの密度に関して標準化される。ある一定の実施形態において、本発明のフォーム組成物は、比較される参照フォーム組成物と実質的に同じ密度を有することを特徴とする。

#### 【0115】

ある一定の実施形態において、本発明は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含む添加剤を含有する高強度軟質ポリウレタンフォーム組成物を提供する。ある一定の実施形態において、本発明フォーム組成物は、ポリカーボネートポリオール添加剤を用いずに処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）よりも低い密度を有することを特徴とし、ASTM D 3574 - 08 試験Eによって求められる強化フォームの引張強度が参照フォームのものと同じまたはこれより高いことをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、組成物は、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるように参照処方物において1つ以上のポリオールの一部を置換することによってフォームが生成されるB側処方物に添加剤が付与されることを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明ポリウレタンフォーム組成物は、強化フォーム配合剤の密度が、参照フォーム配合剤の密度より少なくとも10%低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明強度ポリウレタンフォーム組成物は、強化フォーム配合剤の密度が、参照フォームの密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%、または少なくとも50%低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明フォーム組成物は、密度が、参照フォームの密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%、または少なくとも50%低い一方で、強化フォームの引張強度は、参照フォームの引張強度に少なくとも等しい、これより少なくとも10%高い、少なくとも20%高い、少なくとも30%高い、少なくとも40%高い、少なくとも50%高い、少なくとも75%高い、または少なくとも100%高いことを特徴とする。

#### 【0116】

ある一定の実施形態において、本発明は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含む添加剤を含有する高強度軟質ポリウレタンフォーム組成物（強化フォーム配合剤を示す）であって、ASTM D 3574 - 08 試験Eによって測定される強化フォームの引裂強度が、添加されるポリカーボネー

10

20

30

40

50

トポリオールを用いず処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）の引張強度より高いことを特徴とする、上記組成物を提供する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールが、参照における1つ以上のポリオールの一部の代わりにB側処方物に存在する。好ましくは、このことは、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるときに達成される。ある一定の実施形態において、本発明高強度フォームは、強化フォームの引張強度が、参照フォーム配合剤の引張強度より少なくとも10%高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度フォームは、強化フォームの引張強度が、参照フォームの引張強度より少なくとも10%高い、少なくとも20%高い、少なくとも30%高い、少なくとも40%高い、少なくとも50%高い、または少なくとも100%高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、強化フォーム及び参照フォームの引張強度は、これらが比較される前にフォームの密度に関して標準化される。ある一定の実施形態において、本発明のフォーム組成物は、比較される参照フォーム組成物と実質的に同じ密度を有することを特徴とする。

10

## 【0117】

ある一定の実施形態において、本発明は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含む添加剤を含有する高強度軟質ポリウレタンフォーム組成物を提供する。ある一定の実施形態において、本発明フォーム組成物は、ポリカーボネートポリオール添加剤を用いず処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）よりも低い密度を有することを特徴とし、ASTM D 3574-08試験Fによって求められる強化フォームの引裂強度が、参照フォームのものと等しいまたはこれより高いことをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、該組成物は、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるように参照処方物において1つ以上のポリオールの一部を置換することによってフォームが生成されるB側処方物に添加剤が付与されることを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明ポリウレタンフォーム組成物は、強化フォーム配合剤の密度が、参照フォーム配合剤の密度より少なくとも10%低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明強度ポリウレタンフォーム組成物は、強化フォーム配合剤の密度が、参照フォームの密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%、または少なくとも50%低いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明フォーム組成物は、密度が参照フォームの密度より少なくとも10%、少なくとも20%、少なくとも30%、少なくとも40%、または少なくとも50%低い一方で、強化フォームの引裂強度は、参照フォームの引張強度に少なくとも等しい、これより少なくとも10%高い、少なくとも20%高い、少なくとも30%高い、少なくとも40%高い、少なくとも50%高い、少なくとも75%高い、または少なくとも100%高いことを特徴とする。

20

30

## 【0118】

## B. 粘弾性フォーム組成物

粘弾性（VE）フォームは、低分子量の疎水性ポリオール、プロピレンオキシド及びエチレンオキシドから生成される高分子量のポリオール、ならびに低分子量鎖延長剤の混合物を用いて生成される典型的には水発泡フォームである。これらのフォームは、オープンセル構造を促進する比較的低いイソシアネート指数で通常は生成される。発泡率とオープンセル形態とを平衡させるために、これらのフォームならびに種々の界面活性剤の調製において、高レベルの親水性のオキシエチレン基を有するポリオールが用いられる。軟質（柔軟）フォームを生成するために、VEフォームの生成において、イソシアネート、例えば、TDIまたは4,4'-及び2,4'-MDIの混合物が典型的には用いられる。炭酸カルシウムまたは他の充填剤がこれらの処方物に添加されて、密度（及び耐荷重特性）を増加させかつ粘着性を低減させることもできる。

40

## 【0119】

ある一定の実施形態において、本発明は、B側処方物におけるポリオールの1つ以上の

50

少なくとも一部が、CO<sub>2</sub>及び1つ以上のエポキシドの共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールによって置き換えられていることを特徴とする新規のVEフォームを提供する。ある一定の実施形態において、VEフォーム組成物は、同様の粘弾性特性を有するがポリカーボネートポリオール添加剤を欠失している比較フォームよりも少ない無機充填剤を含有し、またはこれを含有しないことをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、最終のB側組成物が、100部のポリエーテルポリオールを基準にして約1重量部～約100重量部のポリカーボネートポリオールを含有するような量で存在する。ある一定の実施形態において、ポリカーボネートポリオールは、ポリカーボネートポリオールが、得られるB側処方物において、100部のポリエーテルポリオールを基準にして約5部、約10部、約20部、約30部、約40部、約60部、約80部、または約100部を含むような量で存在する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリ(プロピレンカーボネート)を含む。ある一定の実施形態において、当該脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリ(エチレンカーボネート)を含む。ある一定の実施形態において、当該脂肪族ポリカーボネートポリオールは、ポリ(エチレン-コ-プロピレンカーボネート)を含む。

10

## 【0120】

ある一定の実施形態において、本発明の高強度VEフォーム組成物は、フォームが、ポリカーボネートポリオール添加剤を用いずに処方される対応するフォームより高い強度を有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明フォームは、(ASTM D3574-08試験Eによって測定される)破断点引張強度；(ASTM D3574-08試験Fによって測定される)引裂強度；(ASTM D3574-08試験Cによって測定される)圧縮力撓み(CFD)；ならびに(ASTM D3574-08試験Kによって測定される)140 22時間の乾熱エージング後の引張強度及び伸びのうち1つ以上の特性が、ポリカーボネートポリオール添加剤を用いずに処方される対応する参照フォームのものと比較して向上されることを特徴とする。

20

## 【0121】

ある一定の実施形態において、本発明は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含む高強度VEフォーム組成物(強化フォーム配合剤を示す)であって、強化フォームのASTM D3574-08試験Cによって測定されるその圧縮力撓み(CFD)値によって示される荷重負担能力が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するVEフォーム組成物(参照フォーム配合剤を示す)のCFD値より大きいことを特徴とする、上記組成物を提供する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールが、参照フォームにおける1つ以上のポリオールの一部の代わりにB側処方物に存在する。好ましくは、このことは、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるときに達成される。ある一定の実施形態において、本発明高強度フォームは、強化フォームのCFD値が参照フォーム配合剤のCFD値より少なくとも10%高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度フォームは、強化フォームのCFD値が参照フォームのCFD値より少なくとも10%高い、少なくとも20%高い、少なくとも30%高い、少なくとも40%高い、少なくとも50%高い、または少なくとも100%高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、強化フォーム及び参照フォームのCFD値は、これらが比較される前にフォームの密度に関して標準化される。ある一定の実施形態において、本発明のフォーム組成物は、比較される参照フォーム組成物と実質的に同じ密度を有することを特徴とする。

30

40

## 【0122】

ある一定の実施形態において、本発明は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含む添加剤を含有する高強度VEフォーム組成物(強化フォーム配合剤を示す)であって、ASTM D3574-08試験Eによって測定される強化フォームの引張強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いずに処方される対応するフォーム組成物(参照フォーム配合剤を示す)の引張強度

50

より高いことを特徴とする、上記組成物を提供する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、参照における1つ以上のポリオールの一部の代わりにB側処方物に存在する。好ましくは、このことは、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるときに達成される。ある一定の実施形態において、本発明高強度フォームは、強化フォームの引張強度が、参照フォーム配合剤の引張強度より少なくとも10%高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度フォームは、強化フォームの引張強度が、参照フォームの引張強度より少なくとも10%高い、少なくとも20%高い、少なくとも30%高い、少なくとも40%高い、少なくとも50%高い、または少なくとも100%高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、強化フォーム及び参照フォームの引張強度は、これらが比較される前にフォームの密度に関して標準化される。ある一定の実施形態において、本発明のフォーム組成物は、比較される参照フォーム組成物と実質的に同じ密度を有することを特徴とする。

10

## 【0123】

ある一定の実施形態において、本発明は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含む添加剤を含有する高強度VEフォーム組成物（強化フォーム配合剤を示す）であって、ASTM D 3574-08試験Eによって測定される強化フォームの引裂強度が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いず処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）の引張強度より高いことを特徴とする、上記組成物を提供する。ある一定の実施形態において、脂肪族ポリカーボネートポリオールは、参照フォームにおける1つ以上のポリオールの一部の代わりにB側処方物に存在する。好ましくは、このことは、強化フォームに関してのB側処方物の-OH数が参照フォーム配合剤のB側処方物のものと実質的に同じであるときに達成される。ある一定の実施形態において、本発明高強度フォームは、強化フォームの引張強度が、参照フォーム配合剤の引張強度より少なくとも10%高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、高強度フォームは、強化フォームの引張強度が、参照フォームの引張強度より少なくとも10%高い、少なくとも20%高い、少なくとも30%高い、少なくとも40%高い、少なくとも50%高い、または少なくとも100%高いことを特徴とする。ある一定の実施形態において、強化フォーム及び参照フォームの引張強度は、これらが比較される前にフォームの密度に関して標準化される。ある一定の実施形態において、本発明のフォーム組成物は、比較される参照フォーム組成物と実質的に同じ密度を有することを特徴とする。

20

30

## 【0124】

ある一定の実施形態において、本発明は、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含む添加剤を含有する高強度VEフォーム組成物（強化フォーム配合剤を示す）であって、フォームのエネルギー吸収特性が増大されることを特徴とする、上記組成物を提供する。ある一定の実施形態において、ASTM 3574-08のヒステリシス手順Bに従ったヒステリシス損失の増大によって示されるこのエネルギー吸収の増大。ある一定の実施形態において、ヒステリシス損失は、本発明VEフォームにおいて、添加されるポリカーボネートポリオールを用いず処方される対応するフォーム組成物（参照フォーム配合剤を示す）のものよりも大きい。ある一定の実施形態において、本発明高強度フォームは、ヒステリシス損失が、参照フォーム配合剤のものより少なくとも10%大きいことを特徴とする。ある一定の実施形態において、本発明高強度フォームは、ヒステリシス損失が、同一条件下での参照フォームのヒステリシス損失より少なくとも20%大きい、少なくとも30%大きい、少なくとも40%大きい、少なくとも50%大きい、または少なくとも100%大きいことを特徴とする。

40

## 【0125】

ある一定の実施形態において、本発明の粘弾性フォーム組成物は、低減された量の無機充填剤を有することを特徴とする。

## 【0126】

50

### C. 新規の物性を有するフォーム

別の態様において、本発明は、新規の物性の組み合わせを有するフォーム組成物を包含する。ある一定の実施形態において、本発明は、ポリエーテルポリオールを実質的に含むB側混合物とMDIまたはTDIの1つ以上を含むA側混合物との反応生成物を含む軟質ポリウレタンフォームであって、以下の組み合わせを有することを特徴とする：

ASTM D 3574 - 08 試験Aによる  $40 \text{ kg/m}^3$  未満の密度；

ASTM D 3574 - 08 試験Cによる  $1 \text{ psi}$  (または  $3 \text{ kPa}$ ) 超の65%におけるCFD；及び

2.0 ~ 3.0のSAG因子(65%圧縮におけるCFDを25%圧縮におけるCFDで除算することによってASTM D 3574 - 08 試験Cから得られる)；

フォームを提供する。

#### 【0127】

ある一定の実施形態において、本発明フォームは、38未満、36未満、34未満、32未満または  $30 \text{ kg/m}^3$  未満のASTM D 3574 - 08 試験Aによる密度、 $1.6 \text{ psi}$  超のASTM D 3574 - 08 試験Cによる65%におけるCFD、及び約2のSAG因子の組み合わせを有することを特徴とする。

#### 【0128】

ある一定の実施形態において、本発明フォームは、 $0.8 \text{ psi}$  超、 $1.0 \text{ psi}$  超、 $1.2 \text{ psi}$  超、 $1.4 \text{ psi}$  超、または $1.6 \text{ psi}$  超、 $1.8 \text{ psi}$  超、または $2 \text{ psi}$  超のASTM D 3574 - 08 試験Cによる65%におけるCFDと、 $40 \text{ kg/m}^3$  未満の密度及び2~3の快適性因子との組み合わせを有することを特徴とする。

#### 【0129】

ある一定の実施形態において、本発明フォームは、 $1 \text{ psi}$  超、 $1.2 \text{ psi}$  超、 $1.4 \text{ psi}$  超、 $1.5 \text{ psi}$  超、または $1.75 \text{ psi}$  超、または $2 \text{ psi}$  超のASTM D 3574 - 08 試験Cによる65%におけるCFDと；38未満、36未満、34未満、32未満または  $30 \text{ kg/m}^3$  未満のASTM D 3574 - 08 試験Aによる密度、及び2~3の快適性因子との組み合わせを有することを特徴とする。

#### 【0130】

軟質フォームの強度またはCFDを増大させるために現在ポリウレタンフォームの分野において用いられている1つのアプローチは、B側処方物へのグラフトポリオールの添加である。グラフトポリオール(充填ポリオールまたはポリマーポリオールとも呼ばれる)は、ポリエーテル骨格に化学的にグラフトされた、微細に分散されているスチレン-アクリロニトリル、アクリロニトリル、またはポリウレア(PHD)ポリマー固体を含有する。これらは、低密度高弾力性(HR)フォームの耐荷重特性を増大させるのに、ならびにマイクロセルラーフォーム及びキャストエラストマーに韌性を付与するのに用いられる。しかし、これらの材料は、フォームのコストを増大させ、また、他のフォーム特性の減損またはフォームの密度の増大をもたらす場合があり、または、上述のように、望ましくないVOCを完成品に導入する。ある一定の実施形態において、本発明フォームは、上記の物性の組み合わせに加えて、少しのグラフトポリオールを含有するまたはこれを含有しないことを特徴とする。

#### 【0131】

ある一定の実施形態において、上記本発明フォーム組成物は、20%未満のグラフト型ポリオール添加剤を含有することをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、上記本発明フォーム組成物は、10%未満のグラフト型ポリオール添加剤を含有することをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、上記本発明フォーム組成物は、5%未満のグラフト型ポリオール添加剤を含有することをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、上記本発明座席用フォーム組成物は、3%未満のグラフト型ポリオール添加剤を含有することをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、上記本発明座席用フォーム組成物は、2%未満のグラフト型ポリオール添加剤を含有することをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、上記本発明座席用フォーム組成物は、1%未満の

10

20

30

40

50

グラフト型ポリオール添加剤を含有することをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、上記本発明座席用フォーム組成物は、グラフト型ポリオール添加剤を含有しないことをさらに特徴とする。

【0132】

ある一定の実施形態において、かかる充填ポリオールは、ポリウレア分散ポリオール（すなわち、Poly Harnststoff Dispersion (PHD) ポリオール）；ポリウレタン分散ポリオール（すなわち、ポリイソシアネートポリ付加ポリオール (PIPA)）；エポキシ分散ポリオール；アミノプラスト分散、アクリルポリオールなどから選択される。これらは、低密度高弾力性 (HR) フォームの耐荷重特性を増大させるのに、ならびにマイクロセルラーフォーム及びキャストエラストマーに靱性を付与するの

10

【0133】

ある一定の実施形態において、上記本発明フォーム組成物は、5%未満の充填ポリオール添加剤を含有することをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、上記本発明座席用フォーム組成物は、3%未満の充填ポリオール添加剤を含有することをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、上記本発明座席用フォーム組成物は、2%未満の充填ポリオール添加剤を含有することをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、上記本発明座席用フォーム組成物は、1%未満の充填ポリオール添加剤を含有することをさらに特徴とする。ある一定の実施形態において、上記本発明座席用フォーム組成物は、グラフト型、充填、またはアクリルポリオール添加剤を含有しないことをさらに特徴とする。

20

【0134】

必ずしも明確には記載されていないが、完成したフォーム配合剤において典型的なさらなる成分を含む上記フォーム組成物のさらなる改変が、本発明に包含される。これらの組成物は、ポリウレタンフォーム配合剤の分野における一般的な知識と組み合わせて本明細書における教示及び開示に基づいて当業者に容易に明らかである。したがって、本明細書は、これらを詳細には記載していないが、A-及び/またはB側処方物においてさらなる反応成分または添加剤（例えば、触媒、発泡剤、顔料、安定剤、難燃剤、セルオープナー、界面活性剤、反応性希釈剤、抗菌剤、溶媒など）を含む組成物が、本発明によって予測及び包含される。本発明フォームのA側及び/またはB側混合物において利用され得る添加剤の非限定例は、本明細書の終わりに見られるタイトル「添加剤」の別表Cに記載されている。

30

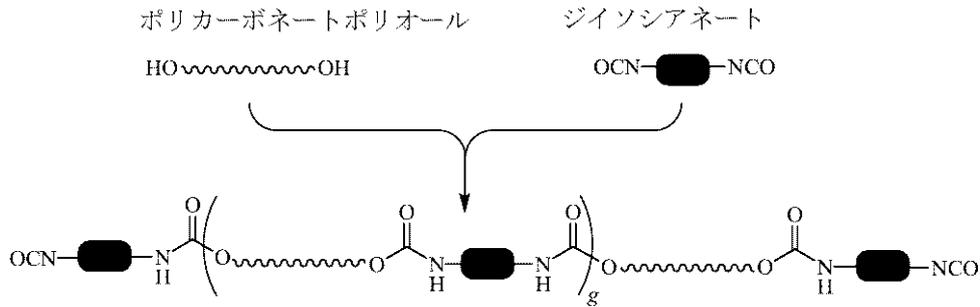
【0135】

III. フォーム添加剤としての有用性を有するイソシアネート末端プレポリマー

別の態様において、本発明は、過剰のポリイソシアネートと上記脂肪族ポリカーボネートポリオールのいずれかとの反応によって誘導されるイソシアネート末端ポリオールを包含する。かかる組成物は、ポリウレタンフォーム配合剤のA側処方物に組み込まれて、向上した強度を付与することができる。スキーム1は、かかる材料がどのようにして作製され得るかの代表例を示す：

40

## 【化10】



10

式中、ポリカーボネートポリオールは、上記、別表A、または本明細書におけるクラス及びサブクラスのうちのいずれかを表し、ジイソシアネートは、2つのアルコールと反応可能であるかまたは反応して2つのウレタン連結を形成する任意の試薬を表し、ここで、gは、0、または最大で約10の整数である。

## 【0136】

好ましくは、gは、プレポリマーのMnが比較的低いままであり、かつ、材料が、典型的なポリウレタンA側混合物に、これを過度に粘性にすることなく溶解され得るような、小さな値である。ある一定の実施形態において、プレポリマー組成物におけるgの平均値は、10未満、5未満、4未満、3未満、2未満、または1未満である。

## 【0137】

20

本発明のプレポリマーは、付随する別表A及びBにおけるものを含めたより高い官能性のポリオール及び/またはより高い官能性のイソシアネートに由来していてもよい。

## 【0138】

別の態様において、本発明は、イソシアネート成分とポリオール成分との反応生成物を含むことを包含し、イソシアネート成分は、約1%～約20%重量%の、CO<sub>2</sub>と1つ以上のエポキシドとの共重合から誘導されるポリオールを含むイソシアネート末端プレポリマーを含む。

## 【実施例】

## 【0139】

本発明を、以下の実施例により例示する。特定の実施例、材料、量及び手順が、本明細書に示された本発明の範囲及び主旨に従って広範囲に解釈されるべきであることを、理解されたい。

30

## 【0140】

## 実施例1：高強度軟質フォーム

以下に、本発明の原理による高強度軟質ポリウレタンフォームの配合を示す。これらの材料は、本明細書に定義された脂肪族ポリカルボネートポリオール添加剤を用いて作製された。具体的には、本明細書の以降に「ノボマーポリオール」と称され、以下の配合で用いられる該脂肪族ポリカルボネートポリオールは、以下の特性を有する：

## 【数 1】

特性	58-103-C	74-276
酸価、mg KOH/g	0.28	0.51
ヒドロキシル価 mg KOH/g	119	61.1
Mn(GPC)	1,270	2,213
Mw(GPC)	1,370	2,443
多分散性、Mw/Mn	1.07	1.06
ガラス転移温度、(DSC)、T <sub>g</sub>	-5°C	-5.5°C
粘度、cPs	80°Cで4,990	-

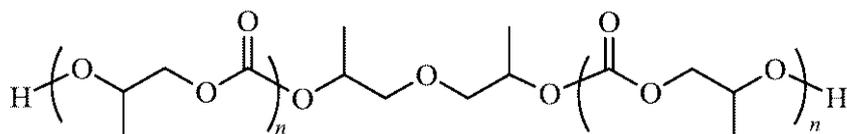
10

## 【0141】

ポリオール58-103-Cは、1.06のPDI、99%を超える-OH末端基、及び99%を超えるカルボナート結合（ジプロピレングリコール内のエーテル結合を除く）を有するジポリプロピレングリコール（異性体混合物）で開始された直鎖状の1270g/molポリ（プロピレンカルボナート）ポリオールである。このポリオールは、式：

## 【化11】

20



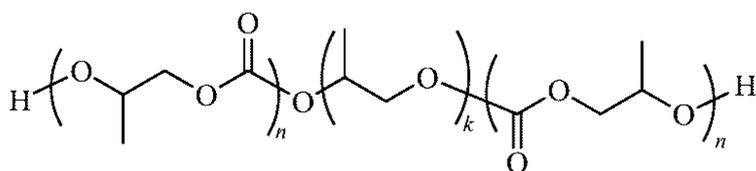
（式中、nは、該組成物中の平均でおよそ5.6である）に従う。

## 【0142】

ポリオール74-276は、1.06のPDI、99%を超える-OH末端基、及び99%を超えるカルボナート結合（ポリプロピレングリコール内のエーテル結合を除く）を有する425g/molポリプロピレングリコール（異性体混合物）で開始された直鎖状の2200g/molポリ（プロピレンカルボナート）ポリオールである。このポリオールは、式：

30

## 【化12】



（式中、kは、該組成物中の平均で約6.8であり、nは、該組成物中の平均でおよそ8.7である）に従う。

40

## 【0143】

この試験の目的は、モデルの高反発（HR）軟質ポリウレタンフォームにおける添加剤としてのCO<sub>2</sub>-系ポリ（プロピレン-カルボナート）ジオール（PPCジオール）の影響を決定することであった。

## 【0144】

フリーライズ及び成形軟質フォームの耐荷重特性及び他の特性に及ぼすこれらのPPCジオールの影響を、市販のグラフトポリオールを用いて、そして用いずに配合されたHR軟質フォームに比較して評価した。

## 【0145】

50

実験：

原材料

この評価で用いられた原材料のリストを、表 1 に示す。ノボマーポリオールをはじめとする材料は全て、供給業者から受け取ったままの状態で使用した。

【 0 1 4 6 】

フォーミング実験において、高反発軟質フォームを目的とする配合を、参照として使用した。この配合は、ポリ - G 85 - 29 エチレンオキシドを先端とするポリエーテルトリオール（ポリオール）を基剤としている。ルマルズ（Lumulse）POE 26（エトキシ化グリセロール）を、反応性セルオープンナーとして用いた。ジエタノールアミンを、触媒及び架橋剤として用いた。

10

【 0 1 4 7 】

フォームの調製及びテスト

フリーライズ水発泡性フォームを、ポリ - G 85 - 29 ポリオールと適合性がある、それぞれ 5 %、10 %、15 %、20 %、及び 25 % のノボマー 58 - 103 C 及びノボマー 74 - 276 ポリオールを用いて調製した（表 2 ~ 4）。フォームは全て、2, 4' - MDI リッチ・イソシアネートであるモンドール（Mondur）MRS - 2 を用いてイソシアネート指数 90 で調製した（表 3 ~ 5）。

【 0 1 4 8 】

成形フォームを、10 % 及び 20 % ノボマー 58 - 103 C で調製した。参照成形フォームも、グラフトポリオールであるスペシフレックス（Speciflex）NC - 701 を用いて、そして用いずに調製した。

20

【 0 1 4 9 】

フリーライズフォームは、標準の検査室での手練り手順を利用して調製した。クリームタイム、ゲルタイム、及びライズタイムをはじめとするフォーミングプロファイルを、全てのフォームで測定した。ライズタイムの後、フォームを直ちに、80 に予熱された空気循環式オープンに 30 分間入れて、硬化を完了させた。

【 0 1 5 0 】

成形フォームは、69 に予熱された 12 x 12 x 2 インチ寸法のアルミニウム金型を用いて作製した。脱型時間は、4.5 分間であった。

【 0 1 5 1 】

全てのフォームを、テスト前に最低でも 1 週間、室内条件下でねかせた。以下の特性を、ASTM D 3574 - 08 に従って測定した：

30

- フォーム密度（テスト A）
- ボールリバウンドによる反発性（テスト H）
- 破断点引張強度（テスト E）
- 破断伸び（テスト E）
- 引裂強度（テスト F）
- CFD、圧縮力撓み（テスト C）
- ヒステリシス（手順 B - CFD ヒステリシス損失）
- 乾燥一定撓み圧縮永久ひずみ（テスト D）
- 湿潤一定撓み圧縮永久ひずみ（テスト D & 湿潤熱老化、テスト L）
- 140 で 22 時間の乾燥熱老化の後の引張強さ及び伸び（改変加熱老化テスト K）

40

)

【表 1 - 1】

表1. 材料		
名称	タイプ	供給業者
<b>ポリオール</b>		
ポリーG 85-29	エチレンオキシド・キャップのポリエーテルポリオール(トリオール) ヒドロキシル価=27.4mg KOH/g; Eq. wt. =2047.445 25°Cでの粘度=1150cPs	アーキ・ケミカルズ (Arch Chemicals)
スペシフレックスNC-701	共重合されたスチレン及びアクリロニトリルを含有するグラフト化ポリエーテルポリオール ヒドロキシル価=23.0mg KOH/g; Eq. wt. =2439.13 25°Cでの粘度=5070mPa. s	ダウ (Dow)
ノボマー58-103C	ノボマーポリ(プロピレンカルボナート) ヒドロキシル価=119mg KOH/g; Eq. wt. =471.43 酸性度=0.28mg KOH/g 25°Cでの粘度=1.25×10 <sup>6</sup> cPs 80°Cでの粘度=4990cPs	ノボマー
ノボマー74-245	ノボマーポリ(プロピレンカルボナート) ヒドロキシル価=34.8mg KOH/g; Eq. wt. =1612.07 80°Cでの粘度=49,650cPs	ノボマー
ノボマー74-266	ノボマーポリ(プロピレンカルボナート) ヒドロキシル価=63mg KOH/g; Eq. wt. =890.47 酸性度=0.24mg KOH/g 80°Cでの粘度=27,240cPs	ノボマー
ノボマー74-276	PPG 600MWで開始されたノボマーポリ(プロピレンカルボナート)ポリオール ヒドロキシル価=61.1mg KOH/g; 酸性度=0.51mg KOH/g Eq. wt. =918.47	ノボマー
<b>界面活性剤</b>		
テゴスタブ (Tegostab)B 4690	ポリエーテル/シリコーンオイルミックス Eq. wt. =1335.7	エボニック (Evonik)
<b>セルオープナー</b>		
ルマルズ (Lumulse)POE 26	ヒドロキシル価=134.8mg KOH/g Eq. wt. =416.2	ラムベント (Lambent)

10

20

30

40

【表 1 - 2】

<b>鎖延長剤</b>		
ジエタノールアミン	ジエタノールアミン (Eq. wt. = 35.04)	アルドリッチ (Aldrich)
<b>触媒</b>		
ダブコ (Dabco) 33LV	ジプロピレングリコール中の33%トリエチレンジアミン	エア・プロダクツ (Air Products)
ニアックス (Niax) A1	ビス(2-ジメチルアミノエチル)エーテル	モメンティブ (Momentive)
<b>イソシアネート</b>		
モンドールMR S-2	2, 4'リッチ・ジフェニルメタンジイソシアネート (F=2.2; Eq. wt. = 130.03; %NCO=32.30%)	バイエル (Bayer)

10

## 【0152】

## 結果

## ポリオール反応性

ポリウレタンフォームを、モデルHR軟質フォーム配合剤中の従来のポリオールポリ-G 85-29の代替として、5%、10%、15%、20%及び25%で調製した。ポリ-G 85-29のドロップイン交換としてPPCポリオール58-103-Cポリオールを参照フォーム配合剤に導入した場合、クリームタイム、ゲルタイム、及びライズタイムとして測定された反応プロファイル(フォーミングプロファイル)に有意な影響を及ぼさなかった。しかしフォームは、調製後にクロードセル構造及び収縮を示した(表3A)。触媒の調整後及びジエタノールアミン(反応性触媒/架橋剤)の量を1重量部から2重量部に増加させた後に、オープンセル構造を有する安定したフォームが得られた(表3A及び3B)。

20

## 【0153】

PPCポリオール74-276ポリオールを基剤とするフォームを、ノボマー58-103Cポリオールを基剤とするフォームで用いられたものと同じ触媒パッケージを用いて調製した。これらの2種のポリオール間の反応性に、有意差は観察されなかった(表3及び4)。

30

## 【0154】

## 見かけのフォームセル構造及び密度

ノボマーポリオールを基剤とするフリーライズフォームは、単独のポリオールとしてポリ-G 85-29ポリオールを用いて調製された参照フォーム、並びに10%及び25%グラフトポリオール スペシフレックスNC-701と共に調製された参照フォームと類似の白色を示した。ノボマーポリオールを有するフォームの見かけのセル構造は、均一であり、参照フォームと類似していた。

40

## 【0155】

フリーライズフォームの密度は、参照ポリオールを5%~25%ノボマーポリオールで交換した場合に有意に変化しなかった(表3及び4)。

【表 3 a - 1】

表3A. 58-103-Cポリオールを基剤とするPUフォームの配合のスクリーニング							
名称	F	Eqv. Weight	1	2	3	4	5
試料の名称			REF-1	10%-58- 103-C-1	10%-58- 103-C-2	10%-58-1 03-C-3	10%-58- 103-C-4
ポリオール系							
ポリ-G 85-29	3	2047.5	97	87.3	87.3	87.3	87.3
ノボマー58-103-C		471.43	0	9.7	9.7	9.7	9.7
水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6
ルマルズPOE26		416.2	3	3	3	3	3
テゴスタブB 4690		1335.7	1	1	1	1	1
ダブコ33LV		105	0.8	0.8	0.8	0.8	0.8
ジエタノールアミン		35.04	1	1	0.6	0.4	0.4
ニアックスA1		233.7	0.1	0.1	0.1	0.1	0.15
イソシアネート系							
モンドールMRS-2		130.03	57.12	59.42	58.09	57.42	57.44

【表 3 a - 2】

インシアネート指数	90	90	90	90	90	90	90	90
ポリオール全体に対する% ノボマーポリオール	0%	10%	10%	10%	10%	10%	10%	10%
フリーライズの反応プロファイル								
混合時間、秒	7	7	7	7	7	7	7	7
クリームタイム、秒	10±0.6	9	12	13	10	10	10	10
ゲルタイム、秒	49±1.0	39	51	51	48	48	48	48
ライズタイム、秒	83±1.5	68	99	106	107	107	107	107
後硬化時間 & 温度*	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分
特性								
フリーライズ密度、pcf	2.26							
反発性、%	60.55±0.73							
引張強さ、psi	14.31±1.06							
破断伸び、%	104.53±7.92							
引裂強度、lbf/in	2.70±0.05							

10

20

30

40



後に切断及び破碎した。

\*\* SAG因子：65%でのCFD / 25%でのCFD及び50%でのCFD / 25%  
でのCFD

【表 3 b - 1】

表3B. ノボマー58-103-Cポリオールを基剤とするPUフォームの配合のスクリーニング								
名称	F	Eqv. Weight	1	2	3	4	5	6
試料の名称			5%-58-103 -C1	10%-58 -103-C -5	15%-58 -103-C -1	20%-58- 103-C-1	25%-58 -103-C -1	25%-58 -103-C -2
ポリオール系								
ポリ-G 85-29	3	2047.5	92.15	87.3	82.45	77.6	72.75	72.25
ノボマー58-103-C		471.43	4.85	9.7	14.55	19.4	24.25	24.25
水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6
ルマルズPOE26		416.2	3	3	3	3	3	3
テゴスタブB 4690		1335.7	1	1	1	1	1	1
ダブコ33LV		105	0.5	0.5	0.5	0.5	0.8	0.5
ジエタノールアミン		35.04	2	2	2	2	0.6	2
ニアックスA1		233.7	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.10
インシアネート系								
モンドールMRS-2		130.03	61.50	62.43	63.35	64.28	60.87	65.21

【表 3 b - 2】

イソシアネート指数	90	90	90	90	90	90	90	90	90
ポリオール全体に対する%ノボマーポリオール	5%	10%	15%	20%	25%	25%	25%	25%	25%
フリーライズの反応プロファイル									
混合時間、秒	7	7	7	7	7	7	7	7	7
クリームタイム、秒	11	13±0.6	12±0.6	12±0.6	12±0.6	12±0.6	12±0.6	12±0.6	11±0.6
ゲルタイム、秒	44	52±1.2	52±1.7	50±0.6	45	45	45	45	49±2.6
ライズタイム、秒	87	87±2.5	103±8.7	98±1.5	100	100	100	100	84±1.7
後硬化時間&温度*	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分
特性									
フリーライズ密度、pcf	2.41	2.16	2.19	2.07	—	—	—	—	2.13
反発性、%	55.05±1.47	42.80±1.90	38.96±1.50	36.0±0.70	—	—	—	—	31.8±1.30
引張強さ、psi	13.24±0.77	15.68±1.89	18.14±1.85	18.93±1.94	—	—	—	—	18.99±2.5
破断伸び、%	105.23±7.70	113.32±14.06	105.75±7.91	130.54±13.15	—	—	—	—	99.68±13.02

【表 3 b - 3】

引裂強度、lbf/in	3.29±0.18	3.73±0.29	3.82±0.25	4.45±0.36	—	4.80±0.20
25%でのCFD、psi	0.27±0.05	0.32±0.04	0.38±0.03	0.45±0.04	—	0.70±0.05
50%でのCFD、psi	0.44±0.08	0.53±0.11	0.65±0.07	0.74±0.07	—	1.13±0.09
65%でのCFD、psi	0.78±0.15	0.94±0.21	1.15±0.17	1.28±0.15	—	1.99±0.20
ヒステリシス	39.21±0.15	44.83±2.94	51.41±0.08	62.09±2.31	—	68.55±3.08
引張強さ(乾燥熱老化)、psi	—	15.03±1.66	—	—	—	—
破断伸び(乾燥熱老化)、%	—	112.25±12.55	—	—	—	—
乾燥圧縮永久歪み、%	—	14.0±3.14	—	—	—	—
湿潤圧縮永久歪み、%	—	18.4±0.93	—	—	—	—
SAG因子(65/25)	2.89	2.94	3.03	2.84	—	2.84
SAG因子(50/25)	1.63	1.66	1.71	1.64	—	1.61
コメント	収縮なし、オープンセル	収縮なし、オープンセル	収縮なし、オープンセル	収縮なし、オープンセル	収縮、クロージドセル	収縮なし、オープンセル

\* 試料をライズタイムの後の後硬化間、オープンに入れた。試料を、硬化の最初の10分

10

20

30

40

50

後に切断及び破碎した。

\*\* SAG因子：65%でのCFD / 25%でのCFD及び50%でのCFD / 25%  
でのCFD

【表 4 - 1】

名称	F	Eqv. Weight	1	2	3	4	5
試料の名称			5%-74-276- 1	10%-74- 276-1	15%-74- 276-1	20%-74-2 76-1	25%-74- 276-1
ポリオール系							
ポリ-G 85-29	3	2047.5	92.15	87.3	82.45	77.6	72.75
ノボマー74-276		918.46	4.85	9.7	14.55	19.4	24.25
水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6
ルマルズPOE26		416.2	3	3	3	3	3
テゴスタブB 4690		1335.7	1	1	1	1	1
ダブコ33LV		105	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
ジエタノールアミン		35.04	2	2	2	2	2
ニアックスA1		233.7	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
イソシアネート系							
モンドールMRS-2		130.03	60.91	61.26	61.60	61.94	62.28

10

20

30

40

【表 4 - 2】

イソシアネート指数	90	90	90	90	90	90
ポリオール全体に対する% ノボマーポリオール	5%	10%	15%	20%	25%	
フリーライズの反応プロファイル						
混合時間、秒	7	7	7	7	7	7
クリームタイム、秒	11	10±1	10	11	11	11
ゲルタイム、秒	49	47±1.0	44	45	46	46
ライズタイム、秒	88	87±1.3	83	90	92	92
後硬化時間&温度*	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分	80°Cで30分
<b>特性</b>						
フリーライズ密度、pcf	2.27	2.38	2.24	2.28	2.35	
反発性、%	55.10±1.40	49.12±1.47	44.46±1.27	38.53±0.73	36.42±1.47	
引張強さ、psi	13.24±0.77	15.34±1.26	-	-	-	
破断伸び、%	105.23±7.70	100.19±6.15	-	-	-	

【表 4 - 3】

引裂強度、lbf/in				3.21±0.1 7	—	—	—	—
25%でのCFD、psi			0.28±0.03	0.36±0.0 5	0.35±0.0 5	0.45±0.07	0.53±0.0 8	—
50%でのCFD、psi			0.47±0.05	0.59±0.0 9	0.56±0.0 7	0.75±0.11	0.87±0.1 3	—
65%でのCFD、psi			0.86±0.11	1.05±0.1 8	0.96±0.1 1	1.35±0.18	1.57±0.2 3	—
ヒステリシス			35.10±2.5	41.96±1. 87	46.15±2. 89	54.59±1.0 6	56.45±1. 72	—
引張強さ(乾燥熱老化)、psi			12.27±1.02	13.95±0. 81	—	—	—	—
破断伸び(乾燥熱老化)、%			93.45±7.49	105.67± 5.20	—	—	—	—
乾燥圧縮永久歪み、%			6.7±1.71	8.2±2.61	—	—	—	—
湿潤圧縮永久歪み、%			12.7±0.83	14.7±2.9 4	—	—	—	—
SAG因子(65/25)			3.07	2.92	2.74	3.00	2.96	—
SAG因子(50/25)			1.68	1.64	1.60	1.67	1.64	—
コメント			収縮なし、オープンセル	収縮なし、オープンセル	収縮なし、オープンセル	収縮なし、オープンセル	収縮なし、オープンセル	収縮なし、オープンセル

\* 試料をライズタイムの後の後硬化間、オープンに入れた。試料を、硬化の最初の10分

10

20

30

40

50

後に切断及び破碎した。

\*\* SAG因子：65%でのCFD / 25%でのCFD及び50%でのCFD / 25%  
でのCFD

【 表 5 - 1 】

表5. スペシブレックスNC-701 ポリオールを基剤とするPUフォームの配合のスクリーニング

名称	F	Eqv. Weight	1	2	3	4	5
試料の名称			10%-NC-701 -1	25%-NC- 701-1			
ポリオール系							
ポリ-G 85-29	3	2047.5	87.3	72.75			
スペシブレックスNC-701		2244	9.7	24.25			
水	2	9	3.6	3.6			
ルマルズPOE26		416.2	3	3			
テゴスタブB 4690		1335.7	1	1			
ダブコ33LV		105	0.8	0.8			
ジエタノールアミン		35.04	1	1			
ニアックスA1		233.7	0.1	0.1			
イソシアネート系							
モンドールMRS-2		130.03	57.01	56.18			

10

20

30

40

【表 5 - 2】

インシアネート指数				90			
ポリオール全体に対する% ノボマーポリオール			0%	0%			
フリーライズの反応プロファイル							
混合時間、秒			7	7			
クリームタイム、秒			11	10			
ゲルタイム、秒			42	33			
ライズタイム、秒			64	47			
後硬化時間 & 温度*			80°Cで30分	80°Cで30分			
<b>特性</b>							
フリーライズ密度、pcf			2.26	2.29			
反発性、%			54.20±1.47	51.24±1.94			
引張強さ、psi			13.65±2.07	14.79±0.98			
破断伸び、%			109.16±9.65	91.96±11.29			

10

20

30

40

【表 5 - 3】

引裂強度、lbf/in				3.08±0.7 5			
25%でのCFD、psi				0.41±0.0 5			
50%でのCFD、psi				0.69±0.0 6			
65%でのCFD、psi				1.22±0.1 1			
ヒステリシス				37.78±3. 16			
引張強さ(乾燥熱老化)、psi				—			
破断伸び(乾燥熱老化)、%				—			
乾燥圧縮永久歪み、%				7.3±1.31			
湿潤圧縮永久歪み、%				8.7±1.64			
SAG因子(65/25)				3.03			
SAG因子(50/25)				1.70			
コメント				収縮なし、オープンセル			

\* 試料をライズタイムの後の後硬化間、オープンに入れた。試料を、硬化の最初の10分

10

20

30

40

50

後に切断及び破碎した。

\*\* SAG因子：65%でのCFD / 25%でのCFD及び50%でのCFD / 25%でのCFD

【表6 - 1】

表6. 成形フォーム						
名称	F	Eqv. Weight	1	2	3	4
試料の名称			REF-1	NC-701	10%-58-103-C-5	20%-58-103-C-1
ポリオール系*						
ポリ-G 85-29	3	2047.5	97	87.3	87.3	77.6
ノボマ-58-103-C		471.43	0	-	9.7	19.4
スペシフレックスNC-701		2244		9.7		
水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6
ルマルズPOE26		416.2	3	3	3	3
テゴスタブB 4690		1335.7	1	1	1	1
ダブコ33LV		105	0.8	0.8	0.5	0.5
ジエタノールアミン		35.04	1	1	2	2
ニアックスA1		233.7	0.1	0.1	0.1	0.1
イソシアネート系						

10

20

30

40

【表 6 - 2】

モドールMRS-2	130.03	57.12	57.01	62.43	64.28
イソシアネート指数		90	90	90	90
ポリオール全体に対する%ノ ポマーポリオール		0%	0%	10%	20%
反応プロファイル		7			
混合時間、秒		7	7	7	7
脱型時間&温度**		70°Cで4分30秒	70°Cで4分30秒	70°Cで4分30秒	70°Cで4分30秒
特性					
成形フォームの密度、pcf		3.30	3.31	3.43	3.14
反発性、%		55.05±1.4	52.93±0.73	38.95±1.5	36.0±0.73
25%でのCFD、psi		0.55±0.03	0.57±0.06	0.86±0.03	1.01±0.06
50%でのCFD、psi		0.88±0.04	0.87±0.10	1.40±0.04	1.59±0.15
65%でのCFD、psi		1.58±0.22	1.43±0.20	2.45±0.05	2.74±0.32
SAG因子(65/25)		2.87	2.51	2.85	2.71

【表 6 - 3】

SAG因子(50/25)			1.60	1.53	1.63	1.57
* 成形フォームの調製に用いられた量は、表に示された量の2倍であった。 ** 金型を70°Cで加熱した。脱型時間は、270秒であった。						

10

20

30

40

## 【0156】

10%及び20% 58-103C PPCポリオールを用いて調製された成形フォームの見かけのセル構造は、均一であり、ポリ-G85-29ポリオールを単独のポリオールとして用いて調製された参照フォーム、及び10%グラフトポリオール スペシフレックスNC-701を用いて調製された参照フォームと類似していた。

## 【0157】

50

## フォームの物理的性質

グラフトポリオール（スペシフレックスNC-701）を用いて調製された参照フリーライズフォームもまた、ベースポリオール（ポリ-G 85-29）を単独のポリオールとして用いて調製された参照フォームに比較して、若干低い反発性及び若干高いヒステリシスを示した（表3A及び5）。グラフトポリオールを基剤とするフォームに比較して、ノボマーポリオールを基剤とするフォームは、同じ荷重で若干低い反発性及び若干高いヒステリシスを示した（表3B、4、及び5）。

### 【0158】

成形フォームをはじめとするノボマーポリオールを用いて調製されたフォームは全て、比較的高い反発性を示し、高反発（HR）PUフォームとして分類することができる。

10

### 【0159】

一般に引張強さは、ノボマーポリオールの導入により上昇した。ノボマーポリオールの導入により、伸びは有意に変化しなかった（表3及び4）。ノボマーポリオールを基剤とするフォームの引張強さ及び伸びは、同じ荷重のグラフトポリオールを基剤とするものと類似していた（表3～5）。これらの結果から、フォームの強度（靱性）がノボマーポリオールの導入により上昇することが示される。

### 【0160】

ノボマーポリオールを用いて調製されたフォームで測定された引裂強度は、ベースポリオールを単独のポリオールとして用いて調製された参照フォームに比較して、有意に高かった（表3及び4）。ノボマーポリオールを基剤とするフォームの引裂強度は、グラフトポリオールを用いて調製された参照フォームに比較して、若干高かった（表3～5）。これらの結果からも、フォームの強度（靱性）がノボマーポリオールの導入により上昇することが示される。

20

### 【0161】

ノボマーポリオールを基剤とするフリーライズフォームは、ベースポリオールを単独のポリオールとして用いて調製された参照フォームに比較して、25%、50%、及び65%の撓みで有意に高い圧縮力撓み（CFD）を示し（表3及び4；図1～2）、グラフトポリオールを基剤とする参照フォームに比較して、わずかに高かった（表3～5；図3）。これらの結果から、ノボマーポリオールが軟質フォームの耐荷重特性を改善することが、明確に示される。より重要なこととして、SAG因子は、フォーム配合剤へのノボマーポリオールの導入により影響を受けなかった（表3～5；図4及び5）。CFD特性に及ぼすノボマーポリオールの同様の影響が、成形フォームの例で観察された（表6）。

30

### 【0162】

引張強さのわずかな低下が、140 での22時間の乾燥老化への耐性についてテストした全てのフォームで観察された。しかし、特性の保持における大きな差異は、グラフトポリオールを含む参照フォーム及び含まない参照フォームと、ノボマーポリオールを用いて調製されたフォームの間で観察されなかった（表3～5）。

### 【0163】

#### 結論

ノボマーポリオールの反応性は、参照ポリオールのポリ-G 85-29及びグラフトポリオールであるスペシフレックスNC-701の反応性と同等であった。しかし、オープンセル構造を得るためには、触媒及びジエタノールアミン量の若干の調整（反応性触媒/架橋剤）が、必要であった。

40

### 【0164】

5%～25%ノボマーポリオールを用いて調製されたフリーライズフォームは、均一なセル構造を示した。これらのフォームの密度及び見かけのセル構造は両者とも、グラフトポリオールを用いて調製された参照フォーム及び用いずに調製された参照フォームと同等であった。

### 【0165】

5%～25%ノボマーポリオールを用いて調製されたフォームは全て、相対的に高い反

50

発性を示し、高反発（HR）PUフォームとして分類することができる。これらのフォームは全て、「発泡成形ポリウレタン 高反発（HR）型 座席への適用」のためのクライスラー材質標準：MS-D C-649に明記された特性のほとんどに適合する参照フォームと同等の特性を示した。

【0166】

ノボマーポリオールを用いて調製されたフォームの引張強さ及び引裂強度は、参照フォームに比較して良好であった。熱老化での応力・歪み特性の保持は、ノボマーポリオールの導入による影響を受けなかった。

【0167】

CFD測定の結果から、SAG（快適性）因子に影響を及ぼさず、ノボマーポリオールを基剤とするフリーライズフォーム及び成形フォームの耐荷重特性を上昇させることが明確に示される。

【0168】

実施例2：粘弾性フォーム組成物

以下に、本発明の原理に従う粘弾性ポリウレタンフォームの配合を示す。これらの材料は、本明細書に定義された脂肪族ポリカルボナートポリオール添加剤を用いて作製された。具体的には、本明細書の以降に「ノボマーポリオール」と称され、以下の配合で用いられる該脂肪族ポリカルボナートポリオールは、以下の特性を有する：

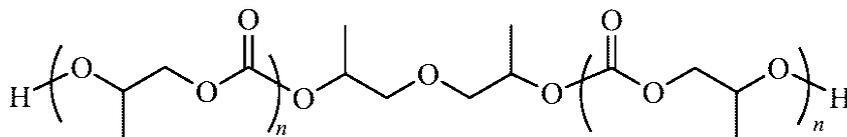
【数2】

	58-103-C	74-217	74-277
酸価、mg KOH/g	0.28	0.02	0.01
ヒドロキシル価 mg KOH/g	119	169.95	67.07
Mn(GPC)	1,270	810	2290
Mw(GPC)	1,370	920	2400
多分散性、Mw/Mn	1.07	1.13	1.05
ガラス転移温度、(DSC)、Tg	-5°C	-20°C	-5°C
粘度、cPs	80°Cで4,990	75°Cで330	75°Cで3700

【0169】

ポリオール58-103-Cは、1.06のPDI、99%を超える-OH末端基、及び99%を超えるカルボナート結合（ジプロピレングリコール内のエーテル結合を除く）を有するジポリプロピレングリコール（異性体混合物）で開始された直鎖状の1270g/molポリ（プロピレンカルボナート）ポリオールである。このポリオールは、式：

【化13】

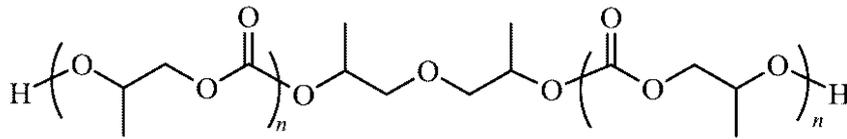


（式中、nは、該組成物中の平均でおよそ5.6である）に従う。

【0170】

ポリオール74-217は、1.13のPDI、99%を超える-OH末端基、及び99%を超えるカルボナート結合（ジプロピレングリコール内のエーテル結合を除く）を有するジポリプロピレングリコール（異性体混合物）で開始された直鎖状の810g/mol

1 ポリ(プロピレンカルボナート)ポリオールである。このポリオールは、式：  
【化14】

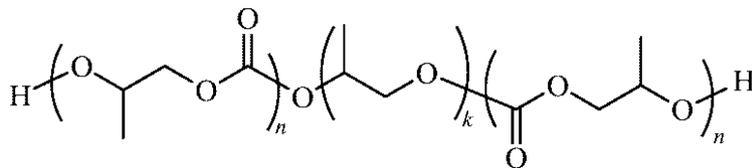


(式中、nは、該組成物中の平均でおよそ3.3である)に従う。

【0171】

ポリオール74-277は、1.05のPDI、99%を超える-OH末端基、及び99%を超えるカルボナート結合(ポリプロピレングリコール内のエーテル結合を除く)を有する600g/molポリプロピレングリコール(異性体混合物)で開始された直鎖状の2400g/molポリ(プロピレンカルボナート)ポリオールである。このポリオールは、式：

【化15】



(式中、kは、該組成物中の平均で約10であり、nは、平均でおよそ9である)に従う。

【0172】

粘弾性ポリウレタンフォームの耐荷重特性(CFD)及び他の特性に及ぼすPPCジオールの影響を、この試験で評価した。フォームは、ノボマーPPCポリオールの混合物も用いて調製した。2,4'-MDIが高含量であるモンドールMRS-2を、フォームの調製においてイソシアネートとして用いた。ノボマーポリオールを用いて調製された粘弾性フォームの特性を、従来のポリオールを用いて調製された参照モデル配合の特性と比較した。

【0173】

原材料

この評価で用いられた原材料のリストを、表1Bに示す。ノボマーポリオールをはじめとする材料は全て、受け取ったままの状態で使用した。

10

20

30

【表 1 b - 1】

表1B. 材料		
名称	タイプ	供給業者
<b>ポリオール</b>		
ノボマーポリオール バッチ番号58-103-C	ノボマーポリオール(プロピレンカルボナート) ヒドロキシル価=119mg KOH/g; Eq. wt. =471.43 酸性度=0.28mg KOH/g	ノボマー
ノボマーポリオール バッチ番号74-217	ヒドロキシル価=169.95mg KOH/g; Eq. wt. =330.1 酸性度=0.02mg KOH/g	ノボマー
ノボマーポリオール バッチ番号74-277	ヒドロキシル価=67.07mg KOH/g; Eq. wt. =836.4 酸性度=0.01mg KOH/g	ノボマー
ポリG30-240	オキシプロピル化ポリエーテルトリオール ヒドロキシル価=238mg KOH/g; Eq. wt. =235.7	アーク
ポリG76-120	エチレンオキシド・キャップのポリエーテルトリオール ヒドロキシル価=119.3mg KOH/g; Eq. wt. =467.5	アーク
ポリG85-34	エチレンオキシド・キャップのポリエーテルトリオール ヒドロキシル価=35mg KOH/g; Eq. wt. =1602.9	アーク
<b>界面活性剤</b>		
テゴスタブB 4690	ポリエーテル/シリコンオイルミックス Eq. wt. =1335.7	エボニック
<b>セルオープナー</b>		
ルマルズPOE 26	ヒドロキシル価=134.8mg KOH/g Eq. wt. =416.2	ラムベント
<b>鎖延長剤</b>		
DEG	ジエチレングリコール	インターステート・ケミカル・カンパニー (Interstate Chem. Com.)
<b>触媒</b>		
ダブコ33LV	ジプロピレングリコール中の33%トリエチレンジアミン	エア・プロダクツ

10

20

30

40

【表 1 b - 2】

ニアックスA1	ビス(2-ジメチルアミノエチル)エーテル	モメンティブ
イソシアネート		
モンドールMR S-2	2, 4' リッチ・ジフェニルメタンジイソシアネート(F=2. 2; Eq. wt. =129. 9; %NCO=32. 35%)	バイエル
充填剤		
炭酸カルシウム	炭酸カルシウム、粉末(工業用)	スペクトラム (Spectrum)

10

## 【 0 1 7 4 】

フォームの調製及びテスト

フリーライズ水発泡性フォームを、石油系の市販ポリオールに代わり0%、10%、及び20%のノボマー58-103C、ノボマー74-217及びノボマー74-277ポリオールを用いて調製した。VEフォームも、石油を基剤とする市販のポリオールの代わりに最大30%及び45%レベルの3種のノボマーポリオールの混合物を用いて調製した(表2B~5B)。参照VEフォーム及びノボマーポリオールを基剤とするVEフォームは、充填剤としてのCaCO<sub>3</sub>も用いて調製した(表2B~5B)。

## 【 0 1 7 5 】

この実施例のVEフォームのほとんどを、2, 4'-MDIリッチのイソシアネートであるモンドール(商標)MRS-2を用いてイソシアネート指数90で調製した。3種のノボマーポリオールの30%及び45%混合物を基剤とするフォームを、イソシアネート指数80でも調製した(表5B)。

20

## 【 0 1 7 6 】

フリーライズフォームは、標準の検査室での手練り手順を利用して調製した。クリームタイム、ゲルタイム、及びライズタイムをはじめとするフォーミングプロファイルを、全てのフォームで測定した。ライズタイムの後、フォームを直ちに、70℃に予熱された空気循環式オープンに60分間入れて、硬化を完了させた。

## 【 0 1 7 7 】

全ての特徴づけを、以下の通りASTM D 3574-08に従って最低でも7日間老化させた後の選択されたフォームで実施した：

30

- フォーム密度(テストA)
- ボールリバウンドによる反発性(テストH)
- 破断点引張強度(テストE)
- 破断伸び(テストE)
- 引裂強度(テストF)
- CFD、圧縮力撓み(テストC)
- ヒステリシス(手順B - CFDヒステリシス損失)
- 乾燥一定撓み圧縮永久ひずみ(テストD)
- 湿潤一定撓み圧縮永久ひずみ(テストD&湿潤熱老化、テストL)

40

## 【 0 1 7 8 】

回復時間を、社内プロトコルを利用してインストロンテスター(Instron Tester)で測定した。以下の測定パラメータを利用した：

- ・ 試料の寸法 2インチ×2インチ×1インチ
- ・ インデント・フット(Indentor Foot)の面積：64mm<sup>2</sup>
- ・ 速度：500mm/分
- ・ 押込み：80%
- ・ 保持時間：60秒

## 【 0 1 7 9 】

回復時間を、以下のプロトコルに従って測定した：テスト標本を支持プレート上に配

50

置させる。インデント・フットを標本に接触させる。直ちに、標本を速度 500 mm / 分で初期の厚さの 80 % まで押込む。60 秒の保圧時間の後、インデントの上方移動を開始させた直後にストップウォッチを始動させて、500 mm / 分の速度でインデントを撓み 0 % に戻す。インデント・フットの跡が見えなくなったらすぐに時計を停止させて、時間を記録する。さらなる 2 種の標本でこの工程を繰り返し実施して、平均時間を計算する。

#### 【0180】

ガラス転移温度は、以下の方法により測定した：

- ・ - 80 ~ + 200 の温度率 (temperature rate)、1 分あたり 20 の加熱速度での窒素下の DSC (TA インストルメント (TA Instrument) の DSC Q10)
- ・ - 80 ~ + 130 の温度率、1 分あたり 3 の加熱速度での窒素下の DMA (TA インストルメントの DMA 2980)

10

#### 【0181】

結果

モデル VE フォーム配合は、3 種の異なる市販ポリエーテルトリオール、つまりそれぞれ等価重量約 236、約 468 及び約 1603 のポリ - G 30 - 240、ポリ - G 76 - 120、及びポリ - G 85 - 34 を基剤とした (表 1 B ~ 5 B)。等価重量約 416 のエトキシ化グリセロールであるルマルズ POE 26 を、セルオープンングポリオールとして用いた (表 1 B ~ 5 B)。ジエチレングリコール (DEG) を、鎖延長剤として用いた。ダブコ 33LV 及びニアックス A - 1 を、触媒として用いた。ダブコ 33LV 触媒は、ゲル化反応 (イソシアネートとポリオールとの反応) 及び泡化反応 (イソシアネートと水との反応) を促進する。ニアックス A - 1 は、泡化触媒である。

20

#### 【0182】

PU システムの反応性は、セルオープンングポリオール (表 2 B) を含む市販のポリオール (表 2 B ~ 4 B) のいずれかをノボマーポリオールで 10 % 及び 20 % ドロップイン交換した後に、有意な影響を受けなかった。PU システムの反応性は、市販のポリオールを 3 種のノボマーポリオールの混合物で 30 % 及び 45 % ドロップイン交換した後に、有意な影響を受けなかった (表 5 B)。ノボマーポリオールを用いてオープンセルフォームを得るのに、触媒の調整は必要なかった (表 2 B ~ 5 B)

#### 【0183】

ノボマーポリオールを基剤とする VE フォームは、参照フォームと類似の白色を示した。ノボマーポリオールを用いたフォームの見かけのセル構造は均一であり、参照フォームと類似していた。

30

#### 【0184】

フォームの物理的性質

25 %、50 % 及び 65 % の撓みでの圧縮力撓み (CFD) は、ノボマーポリオールの導入により上昇した (表 2 B ~ 5 B 及び図 6、10、12 及び 15)。密度に関して標準化した CFD 値から、ノボマーポリオールでのフォームが、参照フォームに比較して高い CFD (より良好な耐荷重特性) を有することが明確に示される (表 2 B ~ 5 B 及び図 7、10、13、及び 16)。CFD のグラフを、図 6 ~ 19 に示す。

40

#### 【0185】

フォーム密度と独立したヒステリシス損失もまた、ノボマーポリオールの導入により上昇しており (表 2 B ~ 5 B 並びに図 8、11、14、及び 17)、ノボマーポリオールを基剤とするフォームが参照フォームよりも大きくエネルギーを吸収することが示される。一般にヒステリシス損失は、ボールリバウンド法により測定された反発性よりも信頼性のあるエネルギー吸収測定法である。この試験で調製されたフォームは全て、1 % 以下という非常に低い反発性を示した (表 2 B ~ 5 B)。

#### 【0186】

VE フォームの引張強さ (図 6 ~ 20) 及び引裂強度 (図 20 ~ 23) は、炭酸カルシウム充填剤を含む場合及び含まない場合の両方で、同様の等価重量のポリ - G 76 - 1

50

20 ポリオールの代わりにノボマーポリオール 58 - 103 - C を導入することにより上昇した (表 2 B の配合 1 及び 2 を配合 4 及び 5 と比較)。測定された引張強さ及び引裂強度は、これらのフォームの CFD 特性と一致している。

【0187】

引張強さ及び引裂強度の上昇は、3 種の市販のベースポリオールの代わりに用いた、3 種のノボマーポリオールの 30% 及び 45% の比例混合物で調製されたフォームでは特に高かった (表 5 B の配合 1 及び 2 を配合 3 及び 4 と比較)。予測通り、イソシアネート指数の 70 から 80 への上昇により、引張強さ及び引裂強度は、ノボマーポリオールの混合物を基剤とするフォームでも上昇した (表 5 B の配合 3 及び 4 を配合 5 及び 6 と比較)。

【0188】

テストされたほとんどのフォームで、破断伸びが、最大荷重での伸び (%歪み) よりもかなり高くなった。一致させるために、最大荷重での伸びを伸びとして報告した。例外なく、全てのフォームが、100% よりも大きな伸びを示した (表 2 B ~ 5 B)。

【0189】

初期厚さの 80% まで押込んだ後の回復時間は、ノボマーポリオールの 1 つのみを用いて調製されたフォームでは有意な影響を受けなかった (表 2 B ~ 4 B)。しかし、市販のベースポリオールの代わりに用いた、30% 及び 45% の 3 種のノボマーポリオールの比例混合物で調製されたフォームは、参照フォームと比較して回復時間が極度に増加した (表 5)。これは、これらのフォームのヒステリシス値と一致している (表 5 B)。

【0190】

乾燥及び湿潤圧縮永久ひずみを、選択された数のフォームで測定した。総ポリオールに基づいて最大 30% までノボマーポリオールを含有する全てのフォームにおいて、乾燥及び湿潤圧縮永久ひずみは、相対的に低く、参照フォームと同等であった (表 2 B ~ 5 B)。

【0191】

DMA 及び DSC の結果

選択されたフォームの DMA 及び DSC のグラフを、図 18 ~ 23 に示す。DMA 及び DSC のグラフの転移を、次のページの表に要約している。

【0192】

参照フォーム (REF - 3、表 2 ~ 5 の配合 # 1) は、-46 の T<sub>g</sub> を示し、それは DMA での測定では損失弾性率の最初の最大値に対応する (図 18 a ; 表 1 C 参照)。tan<sup>δ</sup> ピークは、広がっていて、35 の最大値でも低いピーク高を示した。一般に、tan<sup>δ</sup> ピーク下面積は、エネルギー吸収特性に関係し、より大きな面積は、より高いエネルギー吸収特性に関係することになる。低い T<sub>g</sub> 及び高い tan<sup>δ</sup> 曲線下面積を有するフォームは、形状記憶性フォームに望ましいと見なされる。

【0193】

20% ノボマー 74 - 217 ポリオールを基剤とするフォーム (表 3 B の配合 # 4) は、DMA による測定で参照フォームと同様の T<sub>g</sub> を示した (表 1 C 参照)。DSC により測定された T<sub>g</sub> も、参照フォームと同様であった (表 1 C)。20% ノボマー 74 - 217 ポリオールを組み込むフォームで測定された最大 tan<sup>δ</sup> は、参照フォームに比較してわずかに高い温度であった。しかし tan<sup>δ</sup> ピークは、参照フォームに比較して有意に高く、ピーク下面積は、有意に大きいことから、エネルギー吸収能力がより高いことが示される。これらのデータは、ヒステリシス測定と非常によく相関する。ノボマーフォームのヒステリシス損失は、62% であり、参照フォームのそれは 36% であった (表 3 B の配合 # 1 及び 4)。

10

20

30

40

【表 1 c】

表1C DMA及びDSCで測定された転移				
フォームの名称	配合# (表#)	DMAの転移		DSCの転移
		損失弾性率、°C	最大tan δ、°C	
参照フォーム	F#1(T#2B-5B)	-46.4(Tg); -1.96;+26.1	35.25 (広く低いピーク)	3.28(Tg)
PPC-0.8-DPG-20%	F#4(T#3B)	-43.9(Tg); 3.08;29.6 (弱)	39.35(広く高いピーク)	6.82(Tg)
ノボマー103C-5	F#3(T#2B)	3.08(Tg); 29.3	30.2(広く中程度のピーク)	-2.48(Tg); 112(弱)
PPC-2.3-PEOL-20%	F#4(T#4B)	-33.49(Tg); 0.88;29.28	約40(広く高いピーク)	6.19(Tg); 114.31 (弱); 159.8(弱)
ISO 80%	F#5(T#5B)	-41.38(Tg); 13.81	49.75(広く高いピーク)	13.36(Tg); 108.74(弱)
ISO 80%-15	F#6(T#5B)	28.00(Tg)	55.74(広く高いピーク)	17.37(Tg); 110.08(弱い)

10

20

## 【0194】

18%ノボマー58-103-Cポリオールを基剤とするフォーム(表2B-2の配合#3)は、DMAでの測定で参照フォームよりも有意に高いTgを示した(図18a及び19;上記表も参照)。DMAにより測定されたTgのこのシフトは、1603という高い等価重量を有するポリエーテルポリオールが比較的低い等価重量(471)のノボマーポリオールと交換された、という事実に起因する可能性がある(表2B-2の配合#1及び3)。しかしDSCにより測定されたTgは、参照フォームと比較してノボマーフォームの場合に、わずかに低い温度で検出された(図21及び22;上記表も参照)。

30

## 【0195】

ノボマーフォームの最大値は、30であり、参照フォームに近似していた。tanピーク下面積は、参照フォームと比較して高く、エネルギー吸収能力がより高いことが示される(図18及び19)。これらの結果は、これらの2つのフォームで測定されたヒステリシスとも一致している(表2Bの配合#1及び3)。

40

## 【0196】

20%ノボマー74-277ポリオールを基剤とするフォーム(表4Bの配合#4)は、DMAでの測定で相対的に低いTg(-33.49)を示し、tanピークは、40で広く高い。Tg及び最大tanは両者とも、参照フォームと比較してより高温にわずかにシフトしている(図18及び19、表1C)。DMAにより測定されたエネルギー吸収性は、ヒステリシスの結果と非常によく相関する。このフォームは、参照フォームと比較して有意に高いヒステリシスを示した(表4の配合#1及び4)。

## 【0197】

3種の異なるノボマーポリオールの30%混合物を用いることにより調製されたフォー

50

ム（表5Bの配合#5）は、DMAによる測定で、参照フォームに近似した低いTgを示した。tanピークは、50の最大値で広く高く、参照フォームと比較して有意に高いエネルギー吸収能力を示している（図18及び20a；表1C）。このフォームのヒステリシス値は、高く（73%）、参照フォームのそれは36%であった（表5Bの配合#1及び5）。

【0198】

3種の異なるノボマーポリオールを45%混合物を用いることにより調製されたフォーム（表5Bの配合#6）は、参照フォーム及びノボマーポリオールで調製された他のフォームと比較して相対的に高いTgを示した（図18～20、表1C）。最大tanは、56であり、他のフォームと比較して有意に高かった。tanピークは高く、大きなエネルギー吸収能力を示しており、ヒステリシス損失83%と一致する（表5Bの配合#6）。

10

【0199】

DMA測定に基づけば、ノボマーポリオールは、エネルギー改善された吸収特性を、望ましい特性の粘弾性フォームである該フォームに付与すると結論づけることができる。

【表 2 b - 1 - 1】

表2B-1. ノボマー58-103-Cポリオールを用いて配合された粘弾性フォーム						
名称	Eqv. Weight	1	2	3	4	6
試料の名称		REF-3	CaCO3-2	ノボマー103 C 1*	ノボマー103C 2*	ノボマー103 C 4
総ノボマーポリオール、%		0	0	10	10	10
ポリオール系						
ノボマー58-103-C	471.4	0	0	10	10	10
ポリG30-240	235.7	21	21	17	21	21
ポリG76-120	467.5	21	21	17	21	21
ポリG85-34	1602.9	18	18	16	18	8
ルマルズPOE26	416.2	40	40	40	30	40
CaCO3		0	26	0	0	0
DEG	53.1	2.25	2.25	2.25	2.25	2.25
水	9	2.3	2.3	2.3	2.3	2.3
テゴスタブB 4690	1335.7	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5

10

20

30

40

【表 2 b - 1 - 2】

ダブコ33LV	105	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
ニアックスA1	233.7	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
インシアネート系								
モンドールMRS-2	129.9	49.45	49.45	48.94	49.19	50.81		
インシアネート指数		70	70	70	70	70		
フリーライズの反応プロファイル								
混合時間、秒		10	10	10	10	10		10
クリームタイム、秒		15.33	14	13	16	14		14
ゲルタイム、秒		63.33	52	45	66	56		56
ライズタイム、秒		137.33	136	98	152	83		83
後硬化時間&温度*		70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分		70°Cで60分
特性								
フリーライズ密度、pcf		2.87±0.10	3.37±0.14	2.56±0.17	3.11±0.16	3.15±0.11		3.15±0.11
反発性、%		0.86±0.23	0.76±0.31	0.25±0.00	0.66±0.14	0.56±0.11		0.56±0.11

【表 2 b - 1 - 3】

25%でのCFD、psi	0.06±0.01	0.08±0.01	0.06±0.0	0.15±0.03	0.11±0.0
50%でのCFD、psi	0.09±0.01	0.12±0.01	0.09±0.0	0.19±0.04	0.16±0.0
65%でのCFD、psi	0.14±0.02	0.19±0.02	0.15±0.0	0.28±0.07	0.25±0.0
ヒステリシス	36±3.22	45.40±1.9 8	53.86±1. 36	68.66±3.4 1	39.32±2. 51
引張強さ、psi	11.33±1.89	9.83±0.52	10.89±1. 84	17.13±3.9 7	5.57±1.6 5
最大荷重での伸び、%	192±34	163±17	169±66	180±14	108±23
引裂強度、lbf/in	2.04±0.07	2.45±0.25	2.05±0.2 4	3.00±0.47 3	1.94±0.0 3
回復時間、秒	3.91±1.08	—	—	—	—
70°Cでの乾燥圧縮永久歪み、%	2.7±0.42	—	—	—	—
50°Cでの湿潤圧縮永久歪み、%	2.2±1.16	—	—	—	—
コメント					
*ライズタイムの後、硬化時間の間は試料をオーブンに入れた					

10

20

30

40

【表 2 b - 2 - 1】

表2B-2. ノボマ-58-103-Cポリオールを用いて配合された粘弾性フォーム							
名称	Eqv. Weight	1	2	3	4	5	6
試料の名称		REF-3	CaCO3-2	ノボマ-58-103C	フォーム#3	フォーム#4	フォーム#5
総ノボマ-ポリオール、%		0	0	18	10	10	20
ポリオール系							
ノボマ-58-103-C	471.4	0	0	18	10	10	20
ポリG30-240	235.7	21	21	21	21	21	21
ポリG76-120	467.5	21	21	21	11	11	1
ポリG85-34	1602.9	18	18	0	18	18	18
ルマルズPOE26	416.2	40	40	40	40	40	40
CaCO3		0	26	0	0	26	0
DEG	53.1	2.25	2.25	2.25	2.25	2.25	2.25
水	9	2.3	2.3	2.3	2.3	2.3	2.3
テゴスタブB 4690	1335.7	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5

10

20

30

40

【表 2 b - 2 - 2】

ダブコ33LV	105	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
ニアックスA1	233.7	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
イソシアネート系												
モンドールMRS-2	129.9	49.45	49.45	51.90	49.43	49.43	49.43	49.43	49.43	49.43	49.43	49.41
イソシアネート指数		70	70	70	70	70	70	70	70	70	70	70
フリーライズの反応プロファイル												
混合時間、秒		10	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
クリームタイム、秒		15.33	14	14	17	14	14	14	14	14	14	14
ゲルタイム、秒		63.33	52	58	63	58	63	63	63	63	63	56
ライズタイム、秒		137.33	136	83	156	83	156	156	156	129	131	131
後硬化時間&温度*		70°Cで60分										
<b>特性</b>												
フリーライズ密度、pcf		2.87±0.10	3.37±0.14	3.18±0.17	3.07±0.04	3.18±0.17	3.07±0.04	3.07±0.04	3.07±0.04	3.53±0.31	3.18±0.11	3.18±0.11
反発性、%		0.86±0.23	0.76±0.31	0.56±0.11	2.54±0.00	0.56±0.11	2.54±0.00	2.54±0.00	2.54±0.00	2.54±0.00	0.51±0.00	0.51±0.00

【表 2 b - 2 - 3】

25%でのCFD、psi	0.06±0.01	0.08±0.01	0.08±0.02	0.08±0.01	0.08±0.00	0.14±0.03	0.14±0.02
50%でのCFD、psi	0.09±0.01	0.12±0.01	0.12±0.02	0.12±0.01	0.12±0.01	0.20±0.04	0.19±0.02
65%でのCFD、psi	0.14±0.02	0.19±0.02	0.19±0.03	0.19±0.02	0.19±0.03	0.33±0.07	0.29±0.03
ヒステリシス	36±3.22	45.40±1.98	42.56±1.14	59.10±0.69	61.70±1.08	67.42±1.66	
引張強さ、psi	11.33±1.89	9.83±0.52	5.20±0.63	13.83±1.63	16.15±1.62	21.37±0.81	
最大荷重での伸び、%	192±34	163±17	124±22	187±5	176±10	213±33	
引裂強度、lb/in	2.04±0.07	2.45±0.25	1.62±0.25	2.82±0.39	3.14±0.32	3.59±0.28	
回復時間、秒	3.91±1.08	-	3.30±0.95	-	-	-	
70°Cでの乾燥圧縮永久歪み、%	2.7±0.42	-	2.9±2.78	-	-	-	
50°Cでの湿潤圧縮永久歪み、%	2.2±1.16	-	0.8±0.38	-	-	-	
<b>*ライズタイムの後、硬化時間の間は試料をオーブンに入れた</b>							

10

20

30

40

【表 3 b b - 1】

表3B. ノボマーPPC-0.8-DPGポリオールを用いて配合された粘弾性フォーム						
名称	Eqv. Weight	1	2	3	4	5
試料の名称		REF-3	CaCO3-2	PPC74-21 7-10%	PPC74-217 -20%	フォーム#1
総ノボマーポリオール、%		0	0	10	20	10
ポリオール系						
ノボマー74-217	330.1	0	0	10	20	10
ポリG30-240	235.7	21	21	16	11	16
ポリG76-120	467.5	21	21	16	11	16
ポリG85-34	1602.9	18	18	18	18	18
ルマルズPOE26	416.2	40	40	40	40	40
CaCO3		0	26	0	0	26
DEG	53.1	2.25	2.25	2.25	2.25	2.25
水	9	2.3	2.3	2.3	2.3	2.3
テゴスタブB 4690	1335.7	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5

10

20

30

40

【表 3 b b - 2】

ダブコ33LV	105	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
ニアックスA1	233.7	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
インシアネート系							
モンドールMRS-2	129.9	49.45	49.45	49.30	49.15	49.30	49.30
インシアネート指数		70	70	70	70	70	70
フリーライズの反応プロファイル							
混合時間、秒		10	10	10	10	10	10
クリームタイム、秒		15.33	14	16	16	14	14
ゲルタイム、秒		63.33	52	48	48	43	43
ライズタイム、秒		137.33	136	168	147	128	128
後硬化時間 & 温度*		70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分
特性							
フリーライズ密度、pcf		2.87±0.10	3.37±0.14	3.29±0.11	3.22±0.18	3.76±0.22	3.76±0.22
反発性、%		0.86±0.23	0.76±0.31	0.50±0.00	0.13±0.03	1.27±0.00	1.27±0.00

【表 3 b b - 3】

25%でのCFD、psi	0.06±0.01	0.08±0.01	0.10±0.0	0.11±0.03	0.09±0.0
50%でのCFD、psi	0.09±0.01	0.12±0.01	0.14±0.0	0.15±0.04	0.14±0.0
65%でのCFD、psi	0.14±0.02	0.19±0.02	0.22±0.0	0.24±0.08	0.21±0.0
ヒステリシス	36±3.22	45.40±1.9 8	43.62±1. 51	61.79±1.8 1	57.21±1. 96
引張強さ、psi	11.33±1.89	9.83±0.52	11.55±1. 60	10.91±0.3 7	9.59±0.8 3
最大荷重での伸び、%	192±34	163±17	202±16	213±11	153±15
引裂強度、lbf/in	2.04±0.07	2.45±0.25	1.90±0.1 5	2.16±0.16	2.39±0.3 0
回復時間、秒	3.91±1.08	—	—	10.48±0.4 2	—
70°Cでの乾燥圧縮永久歪み、%	2.7±0.42	—	—	3.3±1.88	—
50°Cでの湿潤圧縮永久歪み、%	2.2±1.16	—	—	1.5±0.99	—
*ライズタイムの後、硬化時間の間は試料をオーブンに入れた					

10

20

30

40

【表 4 b - 1】

表4B. ノボマー74-277ポリオールを用いて配合された粘弾性フォーム

名称	Eqv. Weight	1	2	3	4	5
試料の名称		REF-3	CaCO3-2	74-277-1 0%	74-277-2 0%	フォーム#2
総ノボマーポリオール、%		0	0	10	20	10
ポリオール系						
ノボマー74-277	836.4	0	0	10	20	10
ポリG30-240	235.7	21	21	21	21	21
ポリG76-120	467.5	21	21	16	11	16
ポリG85-34	1602.9	18	18	13	8	13
ルマルズPOE26	416.2	40	40	40	40	40
CaCO3		0	26	0	0	26
DEG	53.1	2.25	2.25	2.25	2.25	2.25
水	9	2.3	2.3	2.3	2.3	2.3
テゴスタブB 4690	1335.7	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5

10

20

30

40

【表 4 b - 2】

ダブコ33LV	105	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
ニアックスA1	233.7	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
イソシアネート系							
モドールMRS-2	129.9	49.45	49.45	49.28	49.11	49.28	
イソシアネート指数		70	70	70	70	70	
フリーライズの反応プロファイル							
混合時間、秒		10	10	10	10	10	10
クリームタイム、秒		15.33	14	14	11	13	13
ゲルタイム、秒		63.33	52	63	47	46	46
ライズタイム、秒		137.33	136	132	129	115	115
後硬化時間&温度*		70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分
特性							
フリーライズ密度、pcf		2.87±0.10	3.37±0.14	3.30±0.17	3.09±0.07	3.60±0.16	3.60±0.16
反発性、%		0.86±0.23	0.76±0.31	0.50±0.00	0.23±0.03	3.05±0.70	3.05±0.70

【表 4 b - 3】

25%でのCFD、psi		0.06±0.01	0.08±0.01	0.15±0.0	0.15±0.01	0.14±0.0
				2		2
50%でのCFD、psi		0.09±0.01	0.12±0.01	0.20±0.0	0.20±0.01	0.20±0.0
				3		3
65%でのCFD、psi		0.14±0.02	0.19±0.02	0.28±0.0	0.30±0.02	0.31±0.0
				5		5
ヒステリシス		36±3.22	45.40±1.9	62.25±3.	60.96±2.4	55.22±1.
			8	67	5	41
引張強さ、psi		11.33±1.89	9.83±0.52	13.05±1.	7.79±1.16	16.49±2.
				36		24
最大荷重での伸び、%		192±34	163±17	192±14	196±36	184±4
引裂強度、lbf/in		2.04±0.07	2.45±0.25	2.25±0.1	2.47±0.22	2.85±0.1
				6		7
回復時間、秒		3.91±1.08	—	—	15.74±0.6	—
					1	
70°Cでの乾燥圧縮永久歪み、%		2.7±0.42	—	—	3.8±1.09	—
50°Cでの湿潤圧縮永久歪み、%		2.2±1.16	—	—	—	—
*ライズタイムの後、硬化時間の間は試料をオーブンに入れた						

10

20

30

40

【表 5 b - 1】

表5B. 異なる3種のノボマーポリオールの混合物を用いて配合された粘弾性フォーム							
名称	Eqv. Weight	1	2	3	4	5	6
試料の名称		REF-3	CaCO3-2	ISO70%-10	ISO70%-5	ISO80%	ISO80%-15
総ノボマーポリオール、%		0	0	30	45	30	45
ポリオール系							
ノボマー58-103-C	471.4	0	0	10	15	10	15
ノボマー74-217	330.1	0	0	10	15	10	15
ノボマー74-277	836.4	0	0	10	15	10	15
ポリG30-240	235.7	21	21	11	6	11	6
ポリG76-120	467.5	21	21	11	6	11	6
ポリG85-34	1602.9	18	18	8	3	8	3
ルマルズPOE26	416.2	40	40	40	40	40	40
CaCO3		0	26	0	0	0	0
DEG	53.1	2.25	2.25	2.25	2.25	2.25	2.25
水	9	2.3	2.3	2.3	2.3	2.3	2.3

10

20

30

40

【表 5 b - 2】

テゴスタブB 4690	1335.7	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5	1.5
ダブコ33LV	105	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
ニアックスA1	233.7	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2	0.2
イソシアネート系									
モンドールMRS-2	129.9	49.45	49.45	48.85	48.55	55.83	55.48		
イソシアネート指数		70	70	70	70	80	80		
フリーライズの反応プロファイル									
混合時間、秒		10	10	10	10	10	10	10	10
クリームタイム、秒		15.33	14	14	14	15	15.5		
ゲルタイム、秒		63.33	52	49	45	48	47		
ライズタイム、秒		137.33	136	137	131	137	124		
後硬化時間&温度*		70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分	70°Cで60分
特性									
フリーライズ密度、pcf		2.87±0.10	3.37±0.14	3.28±0.19	3.31±0.14	3.15±0.13	3.02±0.14		

【表 5 b - 3】

反発性、%		0.86±0.31	0.76±0.31	0.86±0.14	0.66±0.14	1.47±0.11	—
25%でのCFD、psi	0.86±0.23	0.06±0.01	0.08±0.01	0.13±0.02	0.23±0.03	0.36±0.03	0.49±0.07
50%でのCFD、psi	0.09±0.01	0.09±0.01	0.12±0.01	0.17±0.02	0.29±0.04	0.49±0.05	0.62±0.09
65%でのCFD、psi	0.14±0.02	0.14±0.02	0.19±0.02	0.24±0.01	0.41±0.07	0.75±0.10	0.79±0.13
ヒステリシス	36±3.22	45.40±1.98	77.40±3.37	89.87±0.45	72.62±0.97	83.23±1.64	—
引張強さ、psi	11.33±1.89	9.83±0.52	14.70±5.31	21.67±13.00	28.77±5.78	29.32±3.54	—
最大荷重での伸び、%	192±34	163±17	201±20	186±49	192±15	156±14	—
引裂強度、lb/in	2.04±0.07	2.45±0.25	2.49±0.17	3.34±0.22	5.96±0.64	6.44±0.50	—
回復時間、秒	3.91±1.08	—	89±13.45	524±109.5	39±7.55	177.7±9.29	—
70°Cでの乾燥圧縮永久歪み、%	2.7±0.42	—	6.0±3.70	25.2±9.13	2.4±1.82	—	—
50°Cでの湿潤圧縮永久歪み、%	2.2±1.16	—	3.6±2.12	8.0±3.51	3.2±2.02	—	—

【 0 2 0 0 】

10

20

30

40

50

## 結論

V E 配合剤中のノボマーポリオール反応性は、この試験で用いられた参照ポリオールの反応性と同等であった。P Uシステムの反応性は、セルオープニングポリオールをはじめとする、この試験で用いられた市販のポリオールのいずれかの10%及び20%ドロップイン交換の後に、有意な影響を受けなかった。P Uシステムの反応性は、市販のポリオールを3種のノボマーポリオールの混合物で30%及び45%のドロップイン交換を行った後に、有意な影響を受けなかった。ノボマーポリオールによりオープンセルフォームを得るのに、触媒の調整は必要なかった。

## 【0201】

ノボマーポリオールを基剤とするV Eフォームは、参照フォームと類似の白色を示した。ノボマーポリオールを含むフォームの見かけのセル構造は、均一であり、参照フォームと類似していた。

10

## 【0202】

V Eフォームの25%、50%、及び65%歪みでの圧縮力歪み(C F D)は、ノボマーポリオールの導入により上昇した。密度に関して標準化したC F D値から、ノボマーポリオールが参照フォームに比較して、より高いC F D(より良好な耐荷重特性)を有することが示される。

## 【0203】

フォーム密度と独立したヒステリシス損失もまた、ノボマーポリオールの導入により上昇し、ノボマーポリオールを基剤とするフォームが参照V Eフォームよりも大きくエネルギーを吸収することが示される。この試験で調製されたフォームは全て、およそ1%以下の非常に低い反発性を示した。

20

## 【0204】

V Eフォームの引張強さ及び引裂強度は、炭酸カルシウムを充填剤として含む場合、及び含まない場合に、類似の等価重量でポリ-G 76-120ポリオールの代わりにノボマー58-103-Cポリオールを導入することにより上昇した。引張強さ及び引裂強度の上昇は、3種の市販のポリオールの代替りの、30%及び45%の3種のノボマーポリオールの比例混合物で調製されたフォームにおいては特に高い。

## 【0205】

イソシアネート指数が70から80に上昇し、引張強さ及び引裂強度が、ノボマーポリオールの混合物を基剤とするV Eフォームで上昇した。

30

## 【0206】

破断伸びが、最大荷重での伸び(%歪み)よりもかなり高くなった。一致させるために、最大荷重での伸びを伸びとして報告した。例外なく、全てのフォームが、100%よりも大きな伸びを示した。

## 【0207】

市販のベースポリオールの代わりに30%及び45%レベルの3種のノボマーポリオールの比例混合物で調製されたフォームは、参照フォームと比較して回復時間が極度に増加した。これは、これらのフォームのヒステリシス値と一致している。

## 【0208】

乾燥及び湿潤圧縮永久ひずみを、選択された数のV Eフォームで測定した。総ポリオールに基づいて最大30%のノボマーポリオールを含有する全てのフォームにおいて、乾燥及び湿潤の両方の圧縮永久ひずみが、比較的低く、参照フォームと同等であった。

40

## 【0209】

D M A測定に基づけば、ノボマーポリオールが、改善されたエネルギー吸収特性をV Eフォーム配合剤に付与したと、それがヒステリシス損失の結果と一致したと結論づけることができる。高いエネルギー吸収性は、粘弾性フォームに望ましい特徴である。

## 【0210】

実施例3：T D Iを基剤とする座席用フォーム

以下に、本発明の原理に従って調製された高強度T D I系ポリウレタンフォームの配合

50

及び特性を示す。これらの材料は、座席用フォームに適用するための適合性を評価するために作製された。TDIフォームは、本明細書に定義された脂肪族ポリカルボナートポリオール添加剤を用いて作製された。具体的には、本明細書の以降に「ノボマーポリオール」と称され、以下の配合で用いられる該脂肪族ポリカルボナートポリオールは、以下の特性を有する：

【数3】

ポリオールのバッチ番号	58-103-C	74-276	80-148	80-163
酸価、mg KOH/g	0.28	0.51	2.68	2.09
ヒドロキシル価、mg KOH/g	1.19	61.1	111.7	64.9
Mn(GPC)	1,270	2,213	1337	2205
Mw(GPC)	1,370	2,443	1453	2345
多分散性、Mw/Mn	1.07	1.06	1.09	1.06
ガラス転移温度、(DSC)、Tg	-5°C	-5.5°C	6.0°C	-9.9°C

10

【0211】

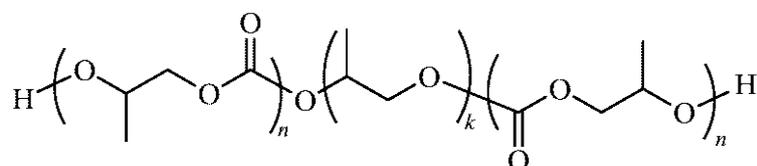
ポリオール58-103-C及び74-276の構造は、上記のこれまでの実施例の中で示されている。

20

【0212】

ポリオール80-163は、1.05のPDI、99%を超える-OH末端基、及び99%を超えるカルボナート結合（ポリプロピレングリコール内のエーテル結合を除く）を有する600g/molポリプロピレングリコール（異性体混合物）で開始された直鎖状の2250g/molポリ（プロピレンカルボナート）ポリオールである。このポリオールは、式：

【化16】



30

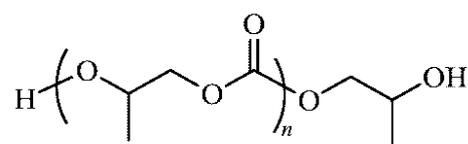
（式中、kは、該組成物中の平均で約9であり、nは、平均でおよそ7である）に従う。

【0213】

ポリオール80-148は、プロピレングリコールで開始され、1340g/molのMn、1.09のPDI、99%を超える-OH末端基、及び99%を超えるカルボナート結合を有する、直鎖状のポリ（プロピレンカルボナート）ポリオールである。このポリオールは、式：

40

【化17】



（式中、nは、該組成物中の平均でおよそ13である）に従う。

【0214】

原材料

この評価で用いられた原材料のリストを、表Ex3-1a及びEx3-1bに示す。ノ

50

ボマーポリオールをはじめとする材料は全て、供給業者から受け取ったままの状態で使用した。

【表3 - 1 a】

名称	表Ex3-1a. 材料 タイプ	供給業者
ポリオール		
ポリ-G 85-29	エチレンオキシド・キャップのポリエチレンポリオール(トリオール) ヒドロキシル価=27.4mg KOH/g; Eq. wt. =2047.445 25°Cでの粘度=1150cPs	アーク・ケミカルズ
ボラノール (Voranol) - ボ ラクティブ (Voractiv)634 0	触媒活性のある高官能性EOキャップ・ポリエーテルポリオール;OH値32mg KOH/g Eq. wt. =1753.13 水分量=0.031%	ダウ
スペシフレック スNC-701	共重合されたスチレン及びアクリロニトリルを含有するグラフト化ポリエーテルポリオール ヒドロキシル価=23.0mg KOH/g; Eq. wt. =2439.13 25°Cでの粘度=5070mPa. s	ダウ
ノボマーPPC -1.2-DPG バッチ58-10 3C	ノボマーポリ(プロピレンカルボナート) ヒドロキシル価=119mg KOH/g; Eq. wt. =471.43 酸性度=0.28mg KOH/g 25°Cでの粘度=1.25×10 <sup>6</sup> cPs 80°Cでの粘度=4990cPs	ノボマー
ノボマーPPC -1kd-PG バッチ80-14 8	ノボマーポリ(プロピレンカルボナート) ヒドロキシル価=111.72mg KOH/g; Eq. wt. =502.15 酸性度=2.68mg KOH/g	ノボマー
ノボマーPPC -2kd-PEO L バッチ80-16 3	ノボマーポリ(プロピレンカルボナート) ヒドロキシル価=64.94mg KOH/g; Eq. wt. =863.87 酸性度=2.09mg KOH/g	ノボマー
ノボマーPPC -2.3-PEO L バッチ74-27 6	ノボマーポリ(プロピレンカルボナート) ヒドロキシル価=61.1mg KOH/g; Eq. wt. =918.47	ノボマー

10

20

30

40

【表 3 - 1 b】

表Ex3-1b. 材料		
名称	タイプ	供給業者
<b>界面活性剤</b>		
テゴスタブB 4 690	ポリエーテル／シリコンオイルミックス Eq. wt. = 1335. 7	エボニック
<b>セルオープナー</b>		
ルマルズPOE 26	ヒドロキシル価=134. 8mg KOH/g Eq. wt. =416. 2	ラムベント
<b>鎖延長剤</b>		
ジエタノールア ミン	Eq. wt. =35. 04	アルドリッチ
<b>触媒</b>		
ダブコ33LV	ジプロピレングリコール中の33%トリエチレンジアミ ン	エア・プロダク ツ
ニアックスA1	ビス(2-ジメチルアミノエチル)エーテル	モメンティブ
<b>イソシアネート</b>		
ルプラネート (Lupranate) (登録商標)T8 0 タイプ1	トルエンジイソシアネート Eq. wt. =87. 54	BASF

10

20

## 【0215】

ノボマーポリオールと市販のポリエーテルポリオールとの可溶性／相溶性

30

フォーミング実験において、高反発軟質フォームを目的とする配合を、参照として使用した。この配合は、ポリ-G 85-29エチレンオキシドを先端とするポリエーテルトリオール(ポリオール)と、触媒活性のある高官能性EOキャップ・ポリエーテルポリオールであるボラノール-ボラクティブ6340との混合物を基剤とする。スペシフレックスNC-701を、グラフト化ポリエーテルポリオールとして用いた。ルマルズPOE26(エトキシ化グリセロール)を、反応性セルオープナーとして用いた。ジエタノールアミンを、共触媒及び架橋剤として用いた。

## 【0216】

フォームの調製及びテスト

フリーライズ水発泡性フォームを、0%、10%、及び20%のスペシフレックスNC-701グラフトポリオールによりイソシアネート指数90で調製した(表Ex3-2~Ex3-5)。参照成形フォームは、0%、10%、15%、20%、及び25%のスペシフレックスNC-701グラフトポリオールで調製した(表Ex3-6~Ex3-10)

40

## 【0217】

フリーライズフォーム及び成形フォームは両者とも、10%及び20%ノボマーPPC-2kd-PEOLポリオール(表Ex3-3及びEx3-8)で調製した。20%では、80-163ポリオール含有成形フォームを、2.5及び3.5pcfフォーム密度を目的として調製した(表8A)。

## 【0218】

50

フリーライズフォームは、市販のポリオールとの相溶性が低いため、10%のポリオール80-148を、成形フォームは10%及び15%のポリオール80-148を用いて調製した(表E×3-5及び表E×3-10)。15%の80-148ポリオールを含有する成形フォームは、2.5及び3.5 p c fのフォーム密度を目的として調製した(表E×3-10)。

#### 【0219】

フリーライズフォームを、10%、12.5%及び26.9%ポリオール74-276(表E×3-2)並びに10%、12.5%及び16.7% 58-103Cポリオール(表E×3-4)を用いて調製した。成形フォームは、これらの2種のポリオールそれぞれの10%(表E×3-7及びE×3-9)及び20%74-276(表E×3-7)を用いて調製した。

10

#### 【0220】

一部の例では、フリーライズフォーム及び成形フォームを、スペシフレックスNC-701グラフト化ポリエーテルポリオールとノボマーポリオールとの混合物で調製した(表E×3-2~E×3-4、E×3-7、E×3-8B及びE×3-9)。

#### 【0221】

フリーライズフォームは、標準の検査室での手練り手順を利用して調製した。クリームタイム、ゲルタイム、及びライズタイムをはじめとするフォーミングプロファイルを、全てのフォームで測定した。ライズタイムの後、フォームを直ちに、80 に予熱された空気循環式オープンに30分間入れて、硬化を完了させた。

20

#### 【0222】

成形フォームは、70 に予熱された12×12×2インチ寸法のアルミニウム金型を用いて作製した。脱型時間は、4.5分間であった。

#### 【0223】

全てのフォームを、テスト前に最低でも1週間、室内条件下でねかせた。詳細評価を、成形フォームについて実施した。以下の特性を、ASTM D 3574-08に従って測定した：

- フォーム密度(テストA)
- ボールリバウンドによる反発性(テストH)
- 破断点引張強度(テストE)
- 破断伸び(テストE)
- 引裂強度(テストF)
- CFD、圧縮力撓み(テストC)
- ヒステリシス(手順B - CFDヒステリシス損失)
- 乾燥一定撓み圧縮永久ひずみ(テストD)
- 湿潤一定撓み圧縮永久ひずみ(テストD&湿潤熱老化、テストL)
- 140 で22時間の乾燥熱老化の後の引張強さ及び伸び(改変加熱老化テストK)

30

#### 【0224】

可燃性を、ASTM D 5132-04を改変した社内法に従って、水平方向燃焼速度として測定した。

40

#### 【0225】

##### IV. 結果

##### ポリオールの相溶性

24時間後、ノボマーPPC-2kd-PEOLポリオールは、ポリ-G85-29ポリオールとボラノール6340ポリオールとの50/50混合物と、最大25%レベルまで相溶性があった。

#### 【0226】

ノボマーポリオール80-148は、ブレンド直後には最大15%レベルまで2種の市販ポリオールの混合物と適合性があった。24時間後に、ブレンドは二相に分離した。

50

## 【 0 2 2 7 】

## ポリオールの反応性

ポリ - G 85 - 29 及びボラノール・ボラクティブ 6340 のドロップイン交換として、4種の異なるノボマーポリオールを参照フォーム配合剤に導入した場合、クリームタイム、ゲルタイム、及びライズタイムとして測定された反応プロファイル（フォーミングプロファイル）に有意な影響を及ぼさなかった（表 E x 3 - 2 ~ E x 3 - 5）。触媒の調整は、必要でなかった。

## 【 0 2 2 8 】

## 見かけのフォームセル構造及び密度

ノボマーポリオールを基剤とするフリーライズフォームは、グラフトポリマーであるスペシフレックス NC - 701 を用いて、又は用いずに調製された参照フォームと類似の白色を示した。ノボマーポリオールを有するフォームの見かけのセル構造は、均一であり、参照フォームと類似していた。

10

## 【 0 2 2 9 】

フリーライズフォームの密度は、ポリ - G 85 - 29 及びボラノール・ボラクティブ 6340 ポリオールをノボマーポリオールでドロップイン交換した場合に有意に変化しなかった（表 E x 3 - 2 ~ E x 3 - 5）。

## 【 0 2 3 0 】

ノボマーポリオールを用いて調製された成形フォームの見かけのセル構造は、均一であり、ポリ - G 85 - 29 とボラノール・ボラクティブ 6340 ポリオールとの混合物を用いて調製された参照フォーム、及びグラフトポリオールであるスペシフレックス NC - 701 を用いて調製された参照フォームと類似していた。

20

## 【 0 2 3 1 】

## フォームの物理的性質

この試験では、フリーライズフォームは、ほとんどが、エポキシド - CO<sub>2</sub> 系ポリオールの反応性及びフォーミングプロファイルへの影響を評価するために調製された。フリーライズ TDI フォームは、同レベルのノボマーポリオールで調製された MDI 系 HR フォーム（実施例 1）に比較して、有意に高い反発性を示した。10% 及び 25% ノボマーポリオール 74 - 276 を用いて調製された MDI 系フォームは、それぞれ 49% 及び 36% の反発性を示した。10% 及び 26.9% の同じポリオールを基剤とする TDI フォームは、53% 及び 42% の反発性を示した。10% 及び 16.7% ノボマーポリオール 58 - 103 を用いて調製された TDI フォームは、それぞれ 55% 及び 45% の反発性を示し、10% 及び 15% の同じポリオールを用いて調製された MDI フォームは、43% 及び 39% の反発性を示した。

30

## 【 0 2 3 2 】

グラフトポリオール（スペシフレックス NC - 701）を用いて調製された参照フリーライズフォームもまた、ベースポリエーテルポリマーを用いて調製された参照フォームに比較して、低い反発性を示した。

## 【 0 2 3 3 】

反発性についてはグラフトポリオール及びノボマーポリオールで同じ影響が、成形フォームで観察された（表 E x 3 - 6 ~ E x 3 - 10）。全ての例において、成形フォームの反発性は、グラフトポリオール及びノボマーポリオールの導入により若干低下し、ヒステリシスは若干上昇した（表 E x 3 - 6 ~ E x 3 - 10）。しかし反発性は、ノボマーポリオールのタイプにかかわらず、同じレベルの MDI 系フォームに比較して有意に高く、ヒステリシスは有意に低くなった（表 E x 3 - 6 ~ E x 3 - 10）。

40

## 【 0 2 3 4 】

ノボマーポリオールを基剤とする成形 TDI フォームは全て、タイプ IV フォームに関するクライスラー材質標準に明記された最大値である 35% よりも低いヒステリシスを示し（表 7 ~ 10、図 24 及び 25）、1例を除いて最小密度要件 2 p c f（32 kg / m<sup>3</sup>）（図 33）を有し、20% ポリオール 74 - 276 を含むフォームは、35.3% の

50

ヒステリシスを示した(表E x 3 - 7)。全ての成形フォームの密度は、およそ  $2.4 \text{ pcf} (38 \text{ kg/m}^3)$  であった。

【0235】

ヒステリシスの結果に基づけば、ノボマーポリオールを用いて調製されたフォームは全て、高反発(HR)PUフォームとして分類することができる。

【0236】

概して言えば引張強さは、ノボマーポリオールの導入により上昇した。ノボマーポリオールの導入により、伸びは有意に変化しなかった(表E x 3 - 7 ~ E x 3 - 10)。これらの結果から、フォームの強度(靱性)がノボマーポリオールの導入により上昇することが示される。

10

【0237】

ノボマーポリオールを用いて調製されたフォームで測定された引裂強度は、ベースポリオールであるポリ-G 85 - 29及びボラノール・ボラクティブ6340を用いて調製された参照フォームに比較して、有意に高かった(表E x 3 - 7 ~ E x 3 - 9)。ポリオール75 - 276、80 - 163、及び58 - 103 - Cポリオールを基剤とするフォームの引裂強度は、グラフトポリオールを基剤とする参照フォームに比較すると類似していた(表E x 3 - 7 ~ E x 3 - 9)。これらの結果からも、フォームの強度(靱性)がノボマーポリオールの導入により上昇することが示される。

【0238】

ノボマーポリオールを基剤とする成形フォームの全てが、ベースポリオールを単独のポリオールとして用いて調製された参照フォームに比較して、25%、50%、及び65%の撓みで有意に高い圧縮力撓み(CFD)を示し、グラフトポリオールを基剤とする参照フォームに比較して、同様であるか、又はわずかに高いCFDとなった(表E x 3 - 7 ~ E x 3 - 10; 図26 ~ 31)。これらの結果から、ノボマーポリオールが軟質フォームの耐荷重特性を改善することが、明確に示される。より重要なこととして、SAG因子は、フォーム配合剤へのノボマーポリオールの導入により影響を受けなかった(表E x 3 - 7 ~ E x 3 - 10; 図32)。

20

【0239】

ノボマーポリオールを基剤とする成形フォームの乾燥及び湿潤圧縮永久ひずみは、参照フォームに比較して若干高かった(E x 3 - 7 ~ E x 3 - 10)。グラフトポリオールを用いて調製された成形フォームもまた、ベースポリエーテルポリオールを用いて調製された参照フォームに比較して、わずかに高い圧縮永久ひずみ値を示した(表E x 3 - 6)。しかし、ノボマーポリオールを用いて調製された成形フォームの全てが、タイプIVフォームに関するクライスラー材質標準により定義された湿潤圧縮永久ひずみの最大要件25%に適合している(図33)。

30

【0240】

実際に、ノボマーポリオールを基剤とする成形フォームの全てが、タイプIVフォームのクライスラー材質標準のヒステリシス損失、引裂耐性、及び湿潤圧縮要件に適合する。

【0241】

成形フォームの可燃性は、ノボマーポリオールの添加により影響を受けなかった。ノボマーポリオールを基剤とする成形フォーム全ての燃焼速度は、およそ  $100 \text{ mm/分}$  であり、それはグラフトポリオールを用いて調製された参照フォーム及び用いずに調製された参照フォームの範囲内である(表E x 3 - 6、E x 3 - 7、E x 3 - 8A、E x 3 - 9、及びE x 3 - 10)。必要に応じて、フォームの可燃性は、少量の難燃剤の添加により容易に調整することができる。

40

【0242】

引張強さ特性の保持は、140 で22時間の乾燥老化の後に測定されたフォーム全てで優れていた(表E x 3 - 6、E x 3 - 7、E x 3 - 8A、E x 3 - 9、及びE x 3 - 10)。幾つかの例において、応力・歪み特性は、乾燥熱老化により改善され、それはMDIフォームにおいては観察されなかった(実施例1)。これは、TDI系ポリマーネット

50

ワークの高温下でのアニーリング効果に起因する可能性がある。

【 0 2 4 3 】

密度 3 . 5 p c f を目的とするノボマーポリオールを用いて調製されたフォームの特性

先に記載された成形フォームの密度は、およそ 2 . 4 p c f ( 約 3 8 k g / m <sup>3</sup> ) であり、これはクライスラー材質標準 M S - D C - 6 4 9 に従う座席適用のためのタイプ I V H R フォームの範囲内である ( 図 3 3 ) 。 2 つのタイプの成形フォームも、密度 3 . 5 p c f ( ~ 5 6 k g / m <sup>3</sup> ) を目的として調製された。 2 0 % ポリオール 7 4 - 1 7 6 ( 表 E x 3 - 8 A の名称 6 B ) 及び 1 5 % ポリオール 8 0 - 1 4 8 ( 表 E x 3 - 1 0 の名称 7 B ) を基剤とする両方のフォームは、より低い密度で調製されたフォームに比較して、高い C F D 特性、高い引張強さ及び高い引裂強度を示した。より重要なこととして、両方のフォームは、低いヒステリシス損失、並びに低い湿潤及び乾燥圧縮永久ひずみを示した ( 表 E x 3 - 8 A 及び E x 3 - 1 0 ) 。

【表 3 - 2 - 1】

表Ex3-2. ポリオール74-276を基剤とするフリーライズフォームの配合

名称	F	Eqv. Weight	1	2	3	4	5	6	7
試料の名称			参照(R-9)	R-10% -NC-70 1	R-20% -NC-70 1	74-276- 1	74-276- -2	74-27 6-3	74-27 6-4
ポリオール全体に対する%ノボマーポリオール			0	0	0	12.5	26.9	10	10
ポリオール全体に対する%グラフトポリオール			0	10	20	0	0	0	10
ポリオール系									
ポリ-G 85-29	3	2047.5	48.5	38.8	38.8	48.5	48.5	38.8	38.8
DVV6340		1753.13	48.5	48.5	38.8	36.37	22.39	48.5	38.8
スペシフレックスNC-701		2244	-	9.7	19.4	-	-	-	9.7
ノボマーPPC-2, 3 -PEOL #74-27 6		918.47	-	-	-	12.126	26.11	9.7	9.7
水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6

10

20

30

40

【表 3 - 2 - 2】

ルマルズPOE26	416. 2	3	3	3	3	3	3	3	3	3
テゴスタブB 4690	1335. 7	1	1	1	1	1	1	1	1	1
ダブコ33LV	105	0. 5	0. 5	0. 5	0. 5	0. 5	0. 5	0. 5	0. 5	0. 5
ジエタノールアミン	35. 04	1	1	1	1	1	1	1	1	1
ニアックスA1	233. 7	0. 05	0. 05	0. 05	0. 05	0. 05	0. 05	0. 05	0. 5	0. 5
イソシアネート系										
ルプラネートTD80	87. 54	38. 83	38. 79	38. 70	39. 32	39. 89	39. 28	38. 85		
イソシアネート指数		90	90	90	90	90	90	90	90	90
フリーライズの反応プロファイル										
フォーミング実験の数		3	1	1	1	1	1	1	1	1
混合時間、秒		5	5	5	5	5	5	5	5	5
クリームタイム、秒		10±1	9	9	9	8	8	8	8	8
ゲルタイム、秒		47±1	48	51	51	55	51	49	49	49
ライズタイム、秒		79±4	86	77	88	80	79	81	81	81
後硬化時間&温度		80°Cで30分	80°Cで30							

【表 3 - 2 - 3】

				分	分	分	分	分	0分	0分
<b>特性</b>										
フリーライズ密度、pcf	1.68±0.04	1.64±0.05	1.78±0.04	1.77±0.06	1.88±0.09	1.75±0.01	1.72±0.02			
反発性、%	66.57±0.7	60.98±2.01	57.16±2.38	53.35±2.38	41.92±1.27	52.85±1.45	55.39±2.13			
25%でのCFD、psi	0.12±0.01	-	-	-	-	-	-			
50%でのCFD、psi	0.19±0.02	-	-	-	-	-	-			
65%でのCFD、psi	0.32±0.03	-	-	-	-	-	-			
<b>コメント</b>										

10

20

30

40

【 表 3 - 3 - 1 】

表Ex3-3. ポリオール80-163を基剤とするフリーライズフォームの配合								
名称	F	Eqv. Weight	1	2	3	4	5	6
試料の名称			参照(R-9)	R-10% -NC-70 1	R-20% -NC-70 1	PPC-80 -163 1 0%	PPC-80 -163-1 0%-S	PPC-80 0-163 20%
ポリオール全体に対する%ノボマーポリオール			0	0	0	10	10	20
ポリオール全体に対する%グラフトポリオール			0	10	20	0	10	0
ポリオール系								
ポリ-G 85-29	3	2047.5	48.5	38.8	38.8	38.8	38.8	29.1
DVV6340		1753.13	48.5	48.5	38.8	48.5	38.8	48.5
スペシフレックスNC-701		2244	-	9.7	19.4	-	9.7	-
ノボマーPPC-2kd-PEOL #80-163		863.87	-	-	-	9.7	9.7	19.4
水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6
ルマルズPOE26		416.2	3	3	3	.	3	3

【表 3 - 3 - 2】

テゴスタブB 4690	1335.7	1	1	1	1	1	1	1	1
ダブコ33LV	105	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
ジエタノールアミン	35.04	1	1	1	1	1	1	1	1
ニアックスA1	233.7	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
イソシアネート系									
ルブラネートTD80	87.54	38.83	38.79	38.70	39.97	39.54	41.12		
イソシアネート指数		90	90	90	91	91	93		
フリーライズの反応ブ ロファイル									
フォーミング実験の数		3	1	1	1	1	1	1	1
混合時間、秒		5	5	5	5	5	5	5	5
クリームタイム、秒		10±1	9	9	8	8	8	8	8
ゲルタイム、秒		47±1	48	51	48	49	47	47	47
ライズタイム、秒		79±4	86	77	81	86	81	81	81
後硬化時間&温度		80°Cで30分							



【表 3 - 4 - 1】

表Ex3-4. ポリオール58-103-Cを基剤とするフリーライズフォームの配合

名称	F	Eqv. Weig ht	1	2	3	4	5	6	7
試料の名称			参照(R-9)	R-10% -NC-70 1	R-20% -NC-70 1	58-103- C-1	58-103- C-2	58-10 3-C-3	58-10 3-C-4
ポリオール全体に対す る%ノボマーポリオー ル			0	0	0	12.5	16.7	10	10
ポリオール全体に対す る%グラフトポリオール			0	10	20	0	0	0	10
ポリオール系									
ポリ-G 85-29	3	2047.5	48.5	38.8	38.8	48.5	48.5	38.8	38.8
DVV6340		1753.13	48.5	48.5	38.8	36.37	32.33	48.5	38.8
スペシフィックスNC- 701		2244	-	9.7	19.4	-	-	-	9.7
ノボマーPPC-1.2 -DPG #58-103		471.43	-	-	-	12.13	16.17	9.7	9.7
水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6
ルマルズPOE26		416.2	3	3	3	3	3	3	3

【表 3 - 4 - 2】

テゴスタブB 4690	1335.7	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
ダブコ33LV	105	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
ジエタノールアミン	35.04	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
ニアックスA1	233.7	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
インシアネート系													
ルプラネートTD80	87.54	38.83	38.79	38.70	39.32	40.80	40.07	40.80	40.07	39.64	40.80	40.07	39.64
インシアネート指数		90	90	90	90	90	90	90	90	90	90	90	90
フリーライズの反応ブ ロファイル													
フォーミング実験の数		3	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
混合時間、秒		5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
クリームタイム、秒		10±1	9	9	9	8	9	8	9	9	9	9	9
ゲルタイム、秒		47±1	48	51	50	53	52	53	52	49	53	52	49
ライズタイム、秒		79±4	86	77	83	91	85	91	85	81	91	85	81
後硬化時間&温度		80°Cで30分											

10

20

30

40



【表 3 - 5 - 1】

表Ex3-5. ポリオール80-148を基剤とするフリーライズフォームの配合									
名称	F	Eqv. Weight	1	2	3	4	5	6	7
試料の名称			参照(R-9)	R-10% -NC-70 1	R-20% -NC-70 1	PPC-80 -148			
ポリオール全体に対する%ノボマーポリオール			0	0	0	10			
ポリオール全体に対する%グラフトポリオール			0	10	20	0			
ポリオール系									
ポリ-G 85-29	3	2047.5	48.5	38.8	38.8	38.8			
DVV6340		1753.13	48.5	48.5	38.8	48.5			
スペシフレックスNC-701		2244	-	9.7	19.4	-			
ノボマーPPC-1kd-PG #80-148		502.15	-	-	-	9.7			
水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6			
ルマルズPOE26		416.2	3	3	3	3			

10

20

30

40

【表 3 - 5 - 2】

テゴスタブB 4690	1335.7	1	1	1	1	1	1	1	1	1			
ダブコ33LV	105	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5			
ジエタノールアミン	35.04	1	1	1	1	1	1	1	1	1			
ニアックスA1	233.7	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05			
イソシアネート系													
ルブラネートTD80	87.54	38.83	38.79	38.70	38.79	38.70	38.79	38.70	38.79	39.34			
イソシアネート指数		90	90	90	90	90	90	90	90	89			
フリーライズの反応ブ ロファイル													
フォーミング実験の数		3	1	1	1	1	1	1	1	1			
混合時間、秒		5	5	5	5	5	5	5	5	5			
クリームタイム、秒		10±1	9	9	9	9	9	9	9	8			
ゲルタイム、秒		47±1	48	48	48	48	48	48	48	48			
ライズタイム、秒		79±4	86	86	86	86	86	86	86	82			
後硬化時間&温度		80°Cで30分											



【 表 3 - 6 - 1 】

名称	F	Eqv. Weight	1	2	3	4	5
試料の名称			参照(R-9)	R-10% -NC-70 1	R-15% -NC-70 1	R-20% -NC-70 1	R-25% -NC-70 1
ポリオール全体に対する%ノボマーポリオール			0	0	0	0	0
ポリオール全体に対する%グラフトポリオール			0	10	15	20	25
ポリオール系							
ポリ-G 85-29	3	2047.5	48.5	38.8	41.23	38.8	36.38
DVV6340		1753.13	48.5	48.5	41.23	38.8	36.38
スペシフィックスNC-701		2244	-	9.7	14.55	19.4	24.25
水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6
ルマルズPOE26		416.2	3	3	3	3	3
テゴスタブB 4690		1335.7	1	1	1	1	1

【表 3 - 6 - 2】

ダブコ33LV	105	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
ジエタノールアミン	35.04	1	1	1	1	1	1	1
ニアックスA1	233.7	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
イソシアネート系								
ルプラネートTD80	87.54	38.83	38.79	38.22	38.70	38.67		
イソシアネート指数		90	90	90	90	90	90	90
フリーライズの反応プロファイル								
混合時間、秒		5	5	5	5	5	5	5
成分の温度、°C		RT	RT	RT	RT	RT	RT	RT
脱型時間、秒		270	270	270	270	270	270	270
成形温度、°C		70	70	70	70	70	70	70
<b>特性</b>								
密度、pcf		2.39±0.02	2.43±0	2.49±0.03	2.36±0.03	2.37±0.03		
反発性、%		66.06±0.90	63.77±2.09	63.26±0.57	59.20±2.31	59.96±1.66		

## 【表 3 - 6 - 3】

25%でのCFD、psi	0.30±0	0.36±0.01	0.42±0.02	0.41±0.01	0.47±0.01
50%でのCFD、psi	0.42±0.01	0.51±0.02	0.58±0.03	0.58±0.02	0.67±0.01
65%でのCFD、psi	0.64±0.02	0.79±0.04	0.87±0.06	0.87±0.05	1.00±0.05
ヒステリシス、%	20.17±0.54	21.75±0.13	22.46±0.37	24.06±0.20	—
湿潤圧縮、%	12.1±0.6	16.1±1.5	15.8±0.9	15.4±0.7	20.0±1.2
乾燥圧縮、%	5.8±0	7.6±1.2	5.8±0.8	7.2±1.5	6.4±1.7
引張強さ、psi	12.57±1.30	16.07±0.73	—	18.28±1.77	—
破断伸び、%	142±14	143±7	—	142±10	—
引裂強度、N/m	605.9±49.8	741.2±41.9	—	898.2±78.3	—
燃焼速度、mm/分	103±5	—	—	98±3	—
乾燥熱老化後の引張強さ、psi	20±1	—	—	25±2	—
乾燥熱老化後の伸長強度 (elongation strength)、%	244±4	—	—	210±16	—
コメント					

10

20

30

40

【 表 3 - 7 - 1 】

表Ex3-7. 参照フォーム及びポリオール74-276を基剤とする成形フォームの配合

名称	F	Eqv. Weig ht	1	2	3	4	5	6
試料の名称			参照(R-9)	R-10% -NC-7 01	R-15% -NC-7 01	74-276 -3	74-276 -4	74-276 7
ポリオール全体に 対する%/ボマー ポリオール			0	0	0	10	10	20
ポリオール全体に 対する%グラフトポ リオール			0	10	20	0	10	0
ポリオール系								
ポリ-G 85-29	3	2047.5	48.5	38.8	38.8	38.8	38.8	38.8
DVV6340		1753.13	48.5	48.5	38.8	48.5	38.8	38.8
スペシフレックスN C-701		2244	-	9.7	19.4	-	9.7	-
ノボマーPPC-2. 3-PEOL #74 -276		918.47	-	-	-	9.7	9.7	19.4
水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6

【表 3 - 7 - 2】

ルマルズPOE26	416.2	3	3	3	3	3	3	3	3
テゴスタブB 469 0	1335.7	1	1	1	1	1	1	1	1
ダブコ33LV	105	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
ジエタノールアミン	35.04	1	1	1	1	1	1	1	1
ニアックスA1	233.7	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.5	0.5
イソシアネート系									
ルプラネートTD80	87.54	38.83	38.79	38.70	39.28	38.85	39.68		
イソシアネート指数		90	90	90	90	90	90	90	90
フリーライズの反応 プロファイル									
混合時間、秒		5	5	5	5	5	5	5	5
成分の温度、°C		RT	RT	RT	RT	RT	RT	RT	RT
脱型時間、秒		270	270	270	270	270	270	270	270
成形温度、°C		70	70	70	70	70	70	70	70
<b>特性</b>									

10

20

30

40

## 【表 3 - 7 - 3】

密度、pcf	2.39± 0.02	2.43±0	2.36± 0.03	2.44± 0.05	2.44± 0.04	2.53±0. 03
反発性、%	66.06± 0.90	63.77± 2.09	59.20± 2.31	58.43± 0.90	56.40± 1.93	52.85± 0.70
25%でのCFD、p si	0.30±0	0.36± 0.01	0.41± 0.01	0.35± 0.01	0.42± 0.01	0.49±0. 02
50%でのCFD、p si	0.42± 0.01	0.51± 0.02	0.58± 0.02	0.50± 0.01	0.60± 0.01	0.68±0. 02
65%でのCFD、p si	0.64± 0.02	0.79± 0.04	0.87± 0.05	0.73± 0.03	0.92± 0.04	0.97±0. 05
ヒステリシス、%	20.17± 0.54	21.75± 0.13	24.06± 0.20	26.17± 0.99	27.98± 0.88	35.32± 0.26
湿潤圧縮、%	12.1± 0.6	16.1± 1.5	15.4± 0.7	17.9± 1.1	24.4± 0.9	24.9±1. 1
乾燥圧縮、%	5.8±0	7.6±1. 2	7.2±1. 5	7.2±2. 1	6.6±1. 2	7.9±0.4
引張強さ、psi	12.57± 1.30	16.07± 0.73	18.28± 1.77	15.53± 1.06	—	15.99± 2.28
破断伸び、%	142±1 4	143±7	142±1 0	149±9	—	165±12
引裂強度、N/m	605.9± 49.8	741.2± 41.9	898.2± 78.3	749.8± 65.2	—	838.5±6 5.4
燃焼速度、mm/ 分	—	—	—	—	—	96±4
乾燥熱老化後の引 張強さ、psi	—	—	—	—	—	15.7±0. 9

【 表 3 - 7 - 4 】

乾燥熱老化後の伸長強度									187±1	
コメント										

10

20

30

40

【 表 3 - 8 a - 1 】

表Ex3-8A. 参照フォーム及びポリオール80-163を基剤とする成形フォームの配合

名称	1	2	3	4	5	6A	6B (より高密度に向けた)	7
試料の名称	参照(R-9)	R-10% -NC-701	R-20% -NC-701	R-25% -NC-701	PPC-80 -163-10%-9 Oil	PPC-80 -163-2 0%	PPC-80 -163-2 0%	PPC-80 -163-2 5%
ポリオール全体に 対する%ノボマー ポリオール	0	0	0	0	10	20	20	25
ポリオール全体に 対する%グラフトポ リオール	0	10	20	25	0	0	0	0
ポリオール系								
ポリ-G 85-29	48.5	38.8	38.8	38.8	38.8	38.8	38.8	36.38
DVV6340	48.5	48.5	38.8	36.38	48.5	38.8	38.8	36.38
スペシブレックスN C-701	-	9.7	19.4	24.25	-	-	-	-
ノボマーPPC-2k d-PEOL #80 -163	-	-	-	-	9.7	19.4	19.4	24.25

10

20

30

40

【表 3 - 8 a - 2】

水	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6
ルマルズPOE26	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
テゴスタブB 469 0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
ダブコ33LV	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
ジエタノールアミン	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
ニアックスA1	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
イソシアネート系											
ルブラネートTD80	38.83	38.79	38.70	38.67	39.34	39.79	39.79	39.79	39.79	40.03	
イソシアネート指数	90	90	90	90	90	90	90	90	90	90	90
フリーライズの反 応プロファイル											
混合時間、秒	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
成分の温度、℃	RT	RT									
脱型時間、秒	270	270	270	270	270	270	270	270	270	270	270
成形温度、℃	70	70	70	70	70	70	70	70	70	70	70
特性											

## 【 表 3 - 8 a - 3 】

密度、pcf	2.39± 0.02	2.43± 0	2.36± 0.03	2.37± 0.03	2.46± 0.03	2.53±0. 08	3.52± 0.08	2.37± 0.07
反発性、%	66.06 ±0.90	63.77 ±2.09	59.20 ±2.31	59.96± 1.66	59.71± 1.27	53.61± 1.06	44.21± 2.44	—
25%でのCFD、p si	0.30± 0	0.36± 0.01	0.41± 0.01	0.47± 0.01	0.42± 0.02	0.42±0. 01	0.83± 0.03	—
50%でのCFD、p si	0.42± 0.01	0.51± 0.02	0.58± 0.02	0.67± 0.01	0.58± 0.03	0.61±0. 01	1.16± 0.04	—
65%でのCFD、p si	0.64± 0.02	0.79± 0.04	0.87± 0.05	1.00± 0.05	0.85± 0.07	0.93±0. 01	1.74± 0.11	—
ヒステリシス、%	20.17 ±0.54	21.75 ±0.13	24.06 ±0.20	—	26.49± 0.69	33.07± 0.68	27.15± 2.36	—
湿潤圧縮、%	12.1± 0.6	16.1± 1.5	15.4± 0.7	20.0± 1.2	20.1± 0.5	24.8±1. 3	20.2± 2.1	—
乾燥圧縮、%	5.8±0	7.6± 1.2	7.2± 1.5	6.4±1. 7	6.8±1. 9	9.1±1.3	7.9±1. 3	—
引張強さ、psi	12.57 ±1.30	16.07 ±0.73	18.28 ±1.77	—	16.92± 1.11	15.54± 0.69	26.34± 1.29	—
破断伸び、%	142±1 4	143±7	142±1 0	—	141±9	158±19	152.24 ±5.56	—
引裂強度、N/m	605.9 ±49.8	741.2 ±41.9	898.2 ±78.3	—	829.0± 76.0	877.7±3 6.2	1231.0 ±106.7	—
燃焼速度、mm/ 分	—	—	—	—	—	98±5	97±11	—
乾燥熱老化後の引 張強さ、psi						14.3±0. 9	29.65± 2.07	

【表 3 - 8 a - 4】

乾燥熱老化後の伸長強度、%									184±14	252.75 ±7.20	
コメント											粗い

10

20

30

40

【表 3 - 8 b - 1】

表Ex3-8B. 参照フォーム及びポリオール80-163を基剤とする成形フォームの配合						
名称	F	Eqv. Weight	1	2	3	4
試料の名称			参照(R-9)	R-10%-NC-701	PPC-80-163-10%	PPC-80-163-10%-S
ポリオール全体に対する%ノボマーポリオール			0	0	10	10
ポリオール全体に対する%グラフトポリオール			0	10	0	10
ポリオール系						
ポリ-G 85-29	3	2047.5	48.5	38.8	38.8	38.8
DVV6340		1753.13	48.5	48.5	48.5	38.8
スペシフレックスNC-701		2244	-	9.7	-	9.7
ノボマーPPC-2kd-PEOL #80-163		863.87	-	-	9.7	9.7

10

20

【表 3 - 8 b - 2】

水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6
ルマルズPOE26		416.2	3	3	3	3
テゴスタブB 4690		1335.7	1	1	1	1
ダブコ33LV		105	0.5	0.5	0.5	0.5
ジエタノールアミン		35.04	1	1	1	1
ニアックスA-1		233.7	0.05	0.05	0.05	0.05
<b>イソシアネート系</b>						
ルプラネートTD80		87.54	38.83	38.79	39.97	39.54
<b>イソシアネート指数</b>			<b>90</b>	<b>90</b>	<b>91</b>	<b>91</b>
<b>フリーライズの反応 プロファイル</b>						
フォーミング実験の 数			2	2	2	2
混合時間、秒			5	5	5	5
成分の温度、°C			RT	RT	RT	RT
脱型時間、秒			270	270	270	270
成形温度、°C			70	70	70	70

10

20

30

【表 3 - 8 b - 3】

<b>特性</b>						
密度、pcf			2.39± 0.02	2.43±0	2.36± 0.03	2.38± 0.04
反発性、%			66.06± 0.90	63.77± 2.09	58.43± 2.69	55.89± 2.01
25%でのCFD、psi			0.30±0	0.36± 0.01	0.37± 0.01	0.41± 0.01
50%でのCFD、psi			0.42± 0.01	0.51± 0.02	0.54± 0.01	0.59± 0.01
65%でのCFD、psi			0.64± 0.02	0.79± 0.04	0.82± 0.03	0.92± 0.03
ヒステリシス、%			20.17± 0.54	21.75± 0.13	27.10± 0.29	28.04± 0.73
湿潤圧縮、%			12.1± 0.6	16.1± 1.5	16.4± 1.1	19.6± 1.4
乾燥圧縮、%			5.8±0	7.6±1. 2	7.9±2. 4	6.6±1. 4
引張強さ、psi			12.57± 1.30	16.07± 0.73	—	—
破断伸び、%			142±1 4	143±7	—	—
引裂強度、N/m			605.9± 49.8	741.2± 41.9	—	—
<b>コメント</b>						

10

20

30

【表 3 - 9 - 1】

表Ex3-9. 参照フォーム及びポリオール58-103Cを基剤とする成形フォームの配合							
名称	F	Eqv. Weig ht	1	2	3	4	5
試料の名称			参照(R-9)	R-10% -NC-7 01	R-20% -NC-7 01	58-103 -C-3	58-103 -C-4
ポリオール全体に 対する%/ポマー ポリオール			0	0	0	10	10
ポリオール全体に 対する%グラフトポ リオール			0	10	20	0	10
ポリオール系							
ポリ-G 85-29	3	2047.5	48.5	38.8	38.8	38.8	38.8
DVV6340		1753.13	48.5	48.5	38.8	48.5	38.8
スペシフレックスN C-701		2244	-	9.7	19.4	-	9.7
ノボマーPPC-1. 2-DPG #58- 103		471.43	-	-	-	9.7	9.7

【表 3 - 9 - 2】

水	2	9	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6
ルマルズPOE26		416.2	3	3	3	3	3	3	3
テゴスタブB 469 0		1335.7	1	1	1	1	1	1	1
ダブコ33LV		105	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
ジエタノールアミン		35.04	1	1	1	1	1	1	1
ニアックスA-1		233.7	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
イソシアネート系									
ルプラネートTD80		87.54	38.83	38.79	38.70	38.70	40.07	39.64	
イソシアネート指数			90	90	90	90	90	90	90
フリーライズの反応 プロファイル									
フォーミング試験の 数			2	2	2	2	2	2	2
混合時間、秒			5	5	5	5	5	5	5
成分の温度、°C			RT	RT	RT	RT	RT	RT	RT
脱型時間、秒			270	270	270	270	270	270	270
成形温度、°C			70	70	70	70	70	70	70



【表 3 - 9 - 4】

乾燥熱老化後の引張強さ、psi	26.4 ± 1.1								
乾燥熱老化後の伸長強度、%	265 ± 23								
コメント									

10

20

30

【 表 3 - 1 0 - 1 】

表 E x 3 - 1 0 . 参照フォーム及びポリオール80-148を基剤とする成形フォームの配合

名称	1	2	3	4	5	6	7A	7B (より高密度に向けた)
試料の名称	参照 (R-9)	R-1 0%-N C-70 1	R-1 5%-N C-70 1	R-2 0%-N C-70 1	PPC- 1kd- PG-1 0%	PPC- 80-1 48-1 0%-9 011	PPC- 80-1 48-1 5%	PPC- 80-1 48-1 5%
ポリオール全体に対する%/ボマーポリオール	0	0	0	0	10	10	15	15
ポリオール全体に対する%グラフトポリオール	0	10	15	20	0	0	0	0
ポリオール系								
ポリ-G 85-29	48.5	38.8	41.2 3	38.8	38.8	38.8	41.23	41.23
DVV6340	48.5	48.5	41.2 3	38.8	48.5	48.5	41.23	41.23
スペシフレックス NC-701	-	9.7	14.5 5	19.4	-	-	-	-
ノボマーPPC-	-	-	-	-	9.7	9.7	14.55	14.55

10

20

30

40

【表 3 - 1 0 - 2】

1kd-PG # 80-148	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6	3.6
水	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3	3
ルマルズPOE2 6	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
テゴスタブB 4 690	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
ダブコ33LV	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
ジエタノールアミ ン	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05	0.05
ニアックスA-1												
イソシアネート系												
ルプラネットTD 80	38.8 3	38.7 9	38.2 2	38.70	39.34	39.97	40.50	40.50	40.50	40.50	40.50	40.50
イソシアネート指 数	90	90	90	90	89	90	90	90	90	90	90	90
フリーライズの反 応プロファイル												
フォロニング実験 の数	2	2	1	2	1	1	1	1	1	1	1	1
混合時間、秒	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5
成分の温度、℃	RT	RT	RT	RT	RT	RT	RT	RT	RT	RT	RT	RT

10

20

30

40

【表 3 - 1 0 - 3】

脱型時間、秒	270	270	270	270	270	270	270	270	270	270	270
成形温度、℃	70	70	70	70	70	70	70	70	70	70	70
特性											
密度、pcf	2.39 ±0.0 2	2.43 ±0 3	2.49 ±0.0 3	2.36± 0.03	2.45± 0.03	2.50± 0.04	2.49± 0.05	2.50± 0.05	2.49± 0.05	2.49± 0.05	2.49± 0.05
反発性、%	66.0 6±0. 90	63.7 7±2. 09	63.2 6±0. 57	59.20 ±2.31	56.15 ±1.66	55.13 ±1.45	51.83 ±1.06	51.83 ±1.06	51.83 ±1.06	51.83 ±1.06	49.03 ±1.70
25%でのCF D、psi	0.30 ±0 1	0.36 ±0.0 1	0.42 ±0.0 2	0.41± 0.01	0.40± 0.02	0.44± 0.01	0.55± 0.02	0.44± 0.01	0.55± 0.02	0.44± 0.01	1.03± 0.03
50%でのCF D、psi	0.42 ±0.0 1	0.51 ±0.0 2	0.58 ±0.0 3	0.58± 0.02	0.57± 0.02	0.61± 0.01	0.78± 0.03	0.61± 0.01	0.78± 0.03	0.61± 0.01	1.43± 0.04
65%でのCF D、psi	0.64 ±0.0 2	0.79 ±0.0 4	0.87 ±0.0 6	0.87± 0.05	0.86± 0.06	0.90± 0.04	1.16± 0.06	0.90± 0.04	1.16± 0.06	0.90± 0.04	2.06± 0.07
ヒステリシス、%	20.1 7±0. 54	21.7 5±0. 13	22.4 6±0. 37	24.06 ±0.20	27.69 ±0.29	29.08 ±0.15	32.28 ±0.38	29.08 ±0.15	32.28 ±0.38	29.08 ±0.15	29.37 ±6.42
湿潤圧縮、%	12.1 ±0.6	16.1 ±1.5	15.8 ±0.9	15.4± 0.7	20.8± 0.7	24.1± 1.5	22.6± 2.1	24.1± 1.5	22.6± 2.1	24.1± 1.5	18.2± 3.6

10

20

30

40

【表 3 - 1 0 - 4】

乾燥圧縮、%	5.8 ± 0	7.6 ± 1.2	5.8 ± 0.8	7.2 ± 1.5	10.8 ± 0.8	8.8 ± 0.3	8.9 ± 0.3	5.2 ± 0.4
引張強さ、psi	12.5 ± 1.7 30	16.0 ± 0.7 73	—	18.28 ± 1.77	—	14.47 ± 1.01	13.29 ± 1.43	14.78 ± 2.17
破断伸び、%	14.2 ± 1.4	14.3 ± 0.7	—	14.2 ± 1.0	—	16.0 ± 0.4	10.9 ± 1.4	9.6 ± 2.2
引裂強度、N/m	605.9 ± 9.8	741.2 ± 41.9	—	898.2 ± 78.3	—	699.0 ± 37.8	619.7 ± 74.4	811.7 ± 49.9
燃焼速度、mm/分	—	—	—	—	—	—	110 ± 5	104 ± 9
乾燥熱老化後の引張強さ、psi							13.0 ± 0.4	19.16 ± 1.90
乾燥熱老化後の伸長強度、%							15.9 ± 9	17.2.1 ± 2.4.13

10

20

30

40

## 【 0 2 4 4 】

## V. 結論

ポリ - G 85 - 29 及びボラノール・ボラクティブ 6340 のドロップイン交換として 4 種の異なるノボマーポリオールを 4 種の参照フォーム配合剤に導入した場合、クリームタイム、ゲルタイム、及びライズタイムとして測定された反応プロファイル (フォーミ

50

ングプロファイル)に有意な影響を及ぼさなかった。

【0245】

フリーライズフォームの密度及び見かけのセル構造は、ノボマーポリオールでのポリ-G 85-29及びボラノール・ボラクティブ6340のドロップイン交換により有意に変化しなかった。

【0246】

ノボマーポリオールを用いて調製された成形フォームの見かけのセル構造は、均一であり、グラフトポリオールを用いて調製された参照フォーム及び用いずに調製された参照フォームと類似していた。

【0247】

ノボマーポリオールを用いて調製された成形フォームは全て、相対的に高い反発性及び相対的に低いヒステリシスを示し、つまり高反発(HR)PUフォームとして分類することができる。

【0248】

ノボマーポリオールを用いて調製されたフォームの引張強さ及び引裂強度は、参照フォームに比較して、若干良好であった。

【0249】

CFD測定の結果から、SAG(快適性)因子に有意な影響を及ぼさずに、ノボマーポリオールを基剤とする成形フォームの耐荷重特性が上昇することが示された。

【0250】

ノボマーポリオールを基剤とするフォームは、参照フォームに比較して、湿潤及び乾燥圧縮永久ひずみを若干上昇させた。しかし、ノボマーポリオールを用いて調製された成形フォームの全てが、タイプIVフォームに関するクライスラー材質標準により定義された湿潤圧縮永久ひずみの最大要件25%に適合した。

【0251】

実際に、ノボマーポリオールを基剤とする成形フォームの全てが、「発泡成形ポリウレタン 高反発(HR)型 座席への適用」のためのクライスラー材質標準:MS-DC-649に明記されたヒステリシス損失、耐引裂性、及び湿潤圧縮要件に適合した(図33)。

【0252】

成形フォームの燃焼性は、ノボマーポリオールの添加による影響を受けなかった。

【0253】

#### 他の実施形態

前述の事柄は、本発明の特定の非限定的実施形態の記載であった。したがって本発明の実施形態が、本発明の原理の適用の例示に過ぎないことが理解されなければならない。本明細書において例示された実施形態の詳細を参照することは、特許請求の範囲を限定するものではなく、実施形態自体は、本発明の本質と見なされる特色を列挙するものである。

【0254】

#### 付録A 脂肪族ポリカルボナートポリオール

この節は、本発明の方法及び組成物において有用性を有する脂肪族ポリカルボナートポリオールの幾つかを説明する。本明細書において参照される脂肪族ポリカルボナートポリオールは、1つ以上のエポキシドと二酸化炭素との共重合により得られる。適切なポリオールの例及びそれを作製する方法は、全体が参照により本明細書に取り込まれるPCT国際公開第2010/028362号に開示されている。

【0255】

用いられた脂肪族ポリカルボナートポリオールが、高い割合で反応性の末端基を有することが、本明細書に記載された実施形態の多くで有利となる。そのような反応性末端基は、典型的にはヒドロキシル基であるが、ポリオールが末端基の化学作用を修飾するように処理されるのであれば、他の反応性官能基が存在してもよい。そのような修飾された材料は、アミノ基、チオール基、アルケン基、カルボキシラート基、シラン、ホスファート誘

10

20

30

40

50

導体、イソシアネート基などが末端であってもよい。本発明の目的では、用語「脂肪族ポリカルボナートポリオール」は、典型的には -OH 末端材料を指すが、他に断りがなければ、末端基修飾組成物を取り込むことは、排除されない。

【0256】

特定の実施形態において、用いられたポリカルボナートポリオールの末端基の少なくとも90%は、反応性基である。特定の実施形態において、用いられたポリカルボナートポリオールの末端基の少なくとも95%、少なくとも96%、少なくとも97%、又は少なくとも98%は、反応性基である。特定の実施形態において、用いられたポリカルボナートポリオールの末端基の99%よりも多く、99.5%よりも多く、99.7%よりも多く、又は99.8%よりも多くは、反応性基である。特定の実施形態において、用いられたポリカルボナートポリオールの末端基の99.9%よりも多くは、反応性基である。

10

【0257】

特定の実施形態において、用いられたポリカルボナートポリオールの末端基の少なくとも90%は、-OH基である。特定の実施形態において、用いられたポリカルボナートポリオールの末端基の少なくとも95%、少なくとも96%、少なくとも97%、又は少なくとも98%は、-OH基である。特定の実施形態において、用いられたポリカルボナートポリオールの末端基の99%よりも多く、99.5%よりも多く、99.7%よりも多く、又は99.8%よりも多くは、-OH基である。特定の実施形態において、用いられたポリカルボナートポリオールの末端基の99.9%よりも多くは、-OH基である。

20

【0258】

ポリオール組成物の-OH末端基含量を表す別の方法は、OH数を報告することによるもので、それは当該技術分野で周知の方法を利用して測定される。特定の実施形態において、本発明において用いられる脂肪族ポリカルボナートポリオールは、約40を超えるOH数を有する。特定の実施形態において、該脂肪族ポリカルボナートポリオールは、50を超える、75を超える、100を超える、又は120を超えるOH数を有する。

【0259】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナートポリオール組成物が、実質的な割合の第一級ヒドロキシル末端基を有する場合に、有利となる。置換されたエポキシドのポリオール由来共重合がなければ、ポリ(エチレンカルボナート)を含む組成物には標準があり、鎖末端の一部又はほとんどが第二級ヒドロキシル基からなるのが一般的である。ポリ(プロピレンカルボナート)ポリオールは、ほとんどの第二級ヒドロキシル末端基を有し得るポリオールの一例である。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、第一級-OH末端基の割合を高めるように処理される。これは、第二級ヒドロキシル基をエチレンオキシド、反応性ラクトンなどの試薬と反応させるなど、当該技術分野で公知の方法により遂行してもよい。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナートポリオールは、ラクトン、カプロラクトンなどで処理して、第一級ヒドロキシル末端基を導入する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナートポリオールは、エチレンオキシドで処理されて、第一級ヒドロキシル末端基を導入する。

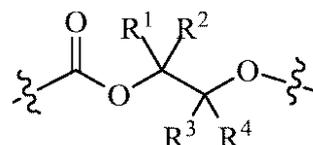
30

【0260】

特定の実施形態において、本発明への有用性を有するポリカルボナートポリオールは、構造：

40

【化18】



(式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ は、ポリマー鎖中の各出現において独立して、-H、フッ素、場合により置換された $C_{1-40}$ 脂肪族基、場合により置換された $C_{1-20}$ ヘテロ脂肪族基及び場合により置換されたアリール基からなる群から選択され、ここでR

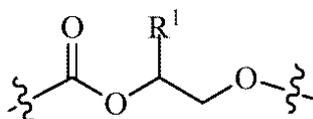
50

<sup>1</sup>、<sup>2</sup>、<sup>3</sup>、及び<sup>4</sup>の任意の2つ以上は、場合により、介入する原子と一緒にあって、場合により1つ以上のヘテロ原子を含む、1つ以上の場合により置換された環を形成し得る)を有する第1の繰り返し単位を含む。

【0261】

特定の実施形態において、本発明への有用性を有するポリカルボナートポリオールは、  
構造：

【化19】



10

(式中、<sup>1</sup>Rは、上記及び本明細書内の分類、下位分類及び実施例に定義された通りである)を有する第1の繰り返し単位を含む。

【0262】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、二酸化炭素とエチレンオキシドとの共重合体を含む。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、二酸化炭素とプロピレンオキシドとの共重合体を含む。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、二酸化炭素とシクロヘキセンオキシドとの共重合体を含む。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、二酸化炭素とシクロペンテンオキシドとの共重合体を含む。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、二酸化炭素と

20

【0263】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、プロピレンオキシド、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、エピクロロヒドリン、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、及び高級オレフィンのエポキシドからなる群から選択される1つ以上の更なるエポキシドを含む、二酸化炭素及びエチレンオキシドのターポリマーを含む。特定の実施形態において、そのようなターポリマーは、エチレンオキシドから得られる大部分の繰り返し単位と、1つ以上の更なるエポキシドから得られるより少量の繰り返し単位とを含む。特定の実施形態において、ターポリマーは、約50%~約99.5%のエチレン

30

【0264】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、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、エピクロロヒドリン、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、及び高級オレフィンのエポキシドからなる群から選択される1つ以上の更なるエポキシドを含む、二酸化炭素及びプロピレンオキシドの共重合体を含む。特定の実施形態において、そのようなターポリマーは、プロピレンオキシドから得られる大部分の繰り返し単位と、1つ以上の更なるエポキシドから得られるより少量の繰り返し単位とを含む。特定の実施形態において、ターポリマーは、約50%~約99.5%のプロピレン

40

50

いて、ターポリマーは、80%を超えるプロピレンオキシド由来繰返し単位を含む。特定の実施形態において、ターポリマーは、85%を超えるプロピレンオキシド由来繰返し単位を含む。特定の実施形態において、ターポリマーは、90%を超えるプロピレンオキシド由来繰返し単位を含む。特定の実施形態において、ターポリマーは、95%を超えるプロピレンオキシド由来繰返し単位を含む。

**【0265】**

特定の実施形態において、本発明における有用性を有する脂肪族ポリカルボナート組成物は、約500g/mol～約25,000g/molの範囲内の数平均分子量( $M_n$ )を有する。

**【0266】**

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約25,000g/mol未満の $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約10,000g/mol未満の $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約5,000g/mol未満の $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約500g/mol～約15,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約500g/mol～約10,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約500g/mol～約5,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約500g/mol～約3,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約500g/mol～約2,500g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約500g/mol～約2,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約500g/mol～約1,500g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約500g/mol～約1,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約1,000g/mol～約5,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約1,000g/mol～約3,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約5,000g/mol～約10,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約5,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約4,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約3,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約2,500g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約2,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約1,500g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約1,000g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約850g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約750g/molの $M_n$ を有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、約500g/molの $M_n$ を有する。

**【0267】**

特定の実施形態において、用いられる脂肪族ポリカルボナートポリオールは、狭い分子量分布を有することを特徴とする。これは、脂肪族ポリカルボナートポリマーの多分散指数(PDI)により示すことができる。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート組成物は、2未満のPDIを有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート組成物は、1.8未満のPDIを有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート組成物は、1.5未満のPDIを有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート組成物は、1.4未満のPDIを有する。特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート組成物は、約1.0～1.2のPDIを有する。特定の実施形態において

10

20

30

40

50

、脂肪族ポリカルボナート組成物は、約 1.0 ~ 1.1 の PDI を有する。

【0268】

特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、高割合のカルボナート結合及び低含量のエーテル結合を含む実質的に交互のポリマーを含む。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 85% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 90% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 91% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 92% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 93% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 94% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 95% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 96% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 97% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 98% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、該組成物中の平均で、カルボナート結合のパーセント率が 99.5% 以上であることを特徴とする。特定の実施形態において、上記のパーセント率は、重合開始剤又は連鎖移動剤中に存在するエーテル結合を除外しており、エポキシド  $C_{2}O_{2}$  共重合の際に形成される結合のみを指す。

【0269】

特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、それらがエポキシド  $C_{2}O_{2}$  共重合から得られるポリマー鎖の中、又は該ポリマー内に存在し得る任意の重合開始剤、連鎖移動剤若しくは末端基のいずれかの中にエーテル結合を本質的に含まないことを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、組成物中のポリマー鎖あたりに平均で 1 未満のエーテル結合を含むことを特徴とする。特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナート組成物は、エーテル結合を本質的に含まないことを特徴とする。

【0270】

脂肪族ポリカルボナートが一置換されたエポキシド（例えば、プロピレンオキシド、1,2-ブチレンオキシド、エピクロロヒドリン、エポキシド化 オレフィン、又はグリシドール誘導体）から得られる特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナートは、それがレジオレギュラー型であることを特徴とする。レジオレギュラリティーは、ポリマー鎖の中の頭-尾配列内に配置された隣接するモノマー単位のパーセント率として表してもよい。特定の実施形態において、本発明のポリマー組成物中の脂肪族ポリカルボナート鎖は、約 80% を超える頭-尾含量を有する。特定の実施形態において、頭-尾含量は、約 85% を超える。特定の実施形態において、頭-尾含量は、約 90% を超える。特定の実施形態において、頭-尾含量は、約 91% を超える、約 92% を超える、約 93% を超える、約 94% を超える、又は約 95% を超える。特定の実施形態において、ポリマーの頭-尾含量は、プロトン又は  $C^{13}NMR$  分光法により決定される通りである。

【0271】

特定の実施形態において、本発明に有用な脂肪族ポリカルボナートポリオールは、特定範囲内になるように制御された粘度を有する。好ましい範囲は、特定の適用例に依存する可能性があり、特定の適用例の正常な範囲内になるように制御されてもよい。

【0272】

脂肪族ポリカルボナートポリオールが硬質フォームの配合剤又は熱可塑性組成物中で用いられる特定の実施形態において、該ポリオールは、約30,000cps未満の、少なくとも20及び70未満の温度で測定された粘度を有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約20,000cps未満、約15,000cps未満、約12,000cps未満、又は約10,000cps未満の粘度を有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約600~約30,000cpsの粘度を有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約2,000~約20,000cpsの粘度を有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約5,000~約15,000cpsの粘度を有する。

10

【0273】

脂肪族ポリカルボナートポリオールが、軟質フォームの配合で用いられる他の実施形態において、該ポリオールは、約10,000cps未満の、少なくとも20及び70未満の温度で測定された粘度を有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約8,000cps未満、約6,000cps未満、約3,000cps未満、又は約2,000cps未満を有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約1,000~約10,000cpsの粘度を有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約1,000~約6,000cpsの粘度を有する。

20

【0274】

特定の実施形態において、上記のポリオール粘度値は、25で測定された粘度を表す。特定の実施形態において、上記の粘度値は、30、40、50、60又は70で測定された粘度を表す。

【0275】

特定の実施形態において、本発明に有用な脂肪族ポリカルボナートポリオールは、特定範囲内のTgを有する。所望のTgは、適用例により様々であるが、特定の適用例の公知の正常範囲内に制御されてもよい。ポリオールが軟質フォーム組成物の配合で用いられる特定の実施形態において、該ポリマーは、約20未満のTgを有する。特定の実施形態において、そのようなポリマーは、約15未満、約10未満、約5未満、約0未満、約-10未満、約-20未満、又は約40未満のTgを有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約-30~約-20のTgを有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約-30~約-20のTgを有する。

30

【0276】

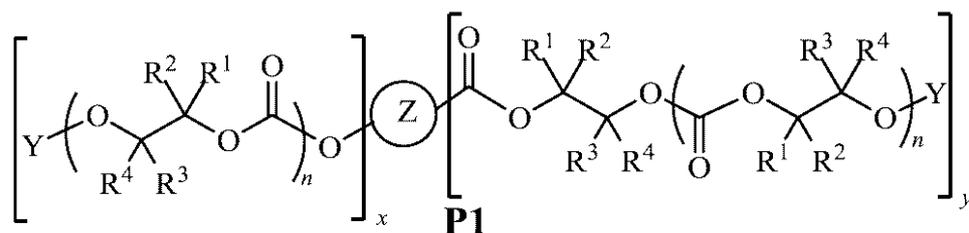
脂肪族ポリカルボナートポリオールが硬質フォーム組成物の配合で用いられる特定の実施形態において、該ポリオールは、約-30を超えるのTgを有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約-20を超える、約-10を超える、約0を超える、約10を超える、約15を超える、又は約25を超えるTgを有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約-10~約30のTgを有する。特定の実施形態において、そのようなポリオールは、約0~約20のTgを有する。

40

【0277】

特定の実施形態において、本発明の組成物は、構造P1：

## 【化20】



(式中、

$R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ は、ポリマー鎖中の各出現において独立して、-H、フッ素、場合により置換された $C_{1-30}$ 脂肪族基、場合により置換された $C_{1-20}$ ヘテロ脂肪族基、及び場合により置換された $C_{6-10}$ アリール基からなる群から選択され、ここで $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ の任意の2つ以上は、場合により介入する原子と一緒にあって、場合により1つ以上のヘテロ原子を含む、1つ以上の場合により置換された環を形成することができ；

Yは、各出現において独立して、-H、又は上記のような別の反応性末端基を含む部分の結合部位であり；

nは、各出現において独立して、約2～約100の整数であり；

((Z))は、多価部分であり；

x及びyは、それぞれ独立して、0～6の整数であり、xとyの合計は、2～6となる)を有する脂肪族ポリカルボナートポリオールを含む。

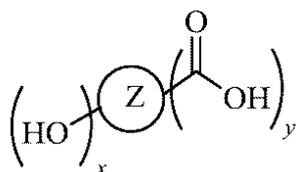
## 【0278】

特定の実施形態において、該脂肪族ポリカルボナート鎖中に組み込まれた多価部分((Z))は、エポキシド/ $CO_2$ 共重合が起こり得る2つ以上の部分を有する多官能性連鎖移動剤から得られる。特定の実施形態において、そのような共重合は、PCT国際公開第2010/028362号内で例証される多官能性連鎖移動剤の存在下で実施される。

## 【0279】

特定の実施形態において、多官能性連鎖移動剤は、式：

## 【化21】



(式中、((Z))、x、及びyのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を有する。

## 【0280】

特定の実施形態において、本発明のポリマー組成物中の脂肪族ポリカルボナート鎖は、スキーム2：

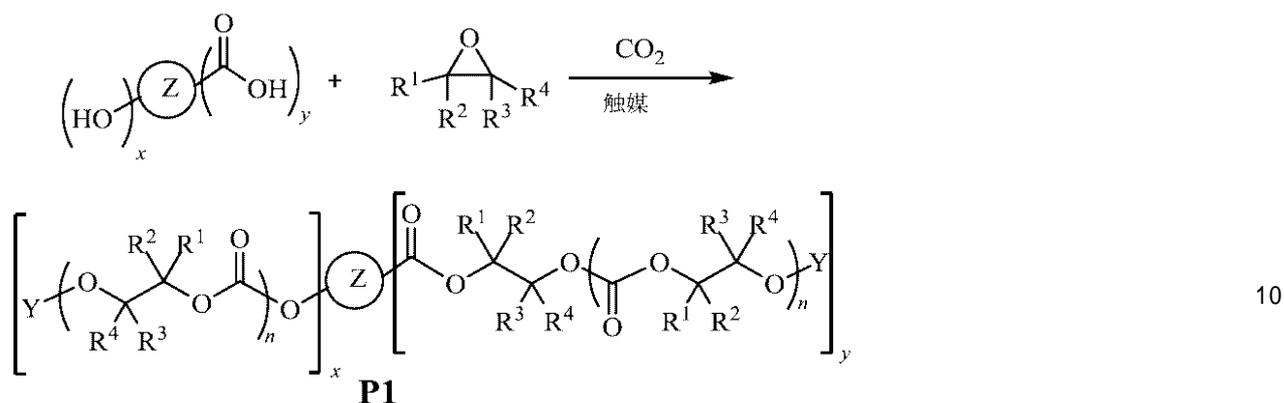
10

20

30

40

## 【化22】

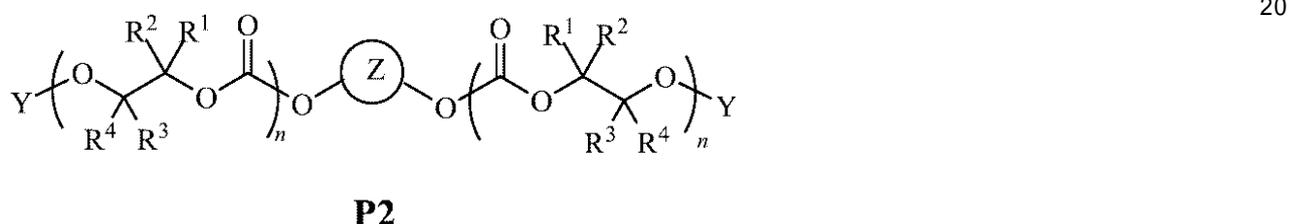


に示された通り、そのような多官能性連鎖移動剤の存在下で、1つ以上のエポキシドと二酸化炭素との共重合から得られる：

## 【0281】

特定の実施形態において、本発明のポリマー組成物中の脂肪族ポリカルボナート鎖は、構造P2：

## 【化23】

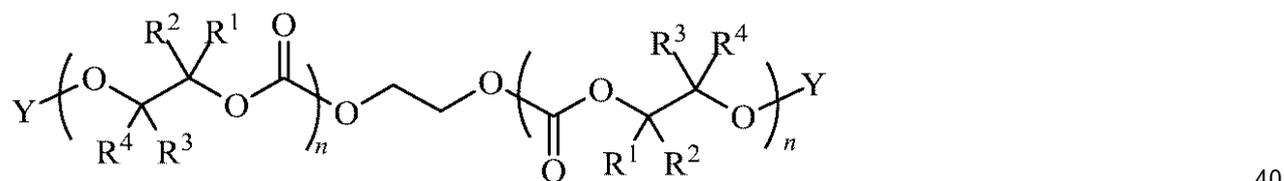


(式中、 $\text{R}^1$ 、 $\text{R}^2$ 、 $\text{R}^3$ 、 $\text{R}^4$ 、 $\text{Y}$ 、 $(\text{Z})$ 及び $n$ のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を有する鎖を含む。

## 【0282】

脂肪族ポリカルボナート鎖が構造P2を有する特定の実施形態において、 $(\text{Z})$ は、二価アルコールから得られる。そのような例において、 $(\text{Z})$ は、二価アルコールの炭素含有バックボーンを表し、 $(\text{Z})$ に隣接する2つの酸素原子は、ジオールの-OH基から得られる。例えば多官能性連鎖移動剤が、エチレングリコールである場合には、 $(\text{Z})$ は、 $-\text{CH}_2\text{CH}_2-$ となり、P2は、以下の構造：

## 【化24】



を有する。

## 【0283】

これが本明細書に記載された他の多官能性連鎖移動剤にあてはまり、用いられた連鎖移動剤の構造と得られたポリオール内の $(\text{Z})$ の構造の間に連鎖が存在することは、当業者に明白であろう。

## 【0284】

$(\text{Z})$ が二価アルコールから得られる特定の実施形態において、二価アルコールは、 $\text{C}_{2-40}$ ジオールを含む。特定の実施形態において、二価アルコールは、1,2-エタンジオール、1,2-プロパンジオール、1,3-プロパンジオール、1,2-ブタン

10

20

30

40

50

ジオール、1,3-ブタンジオール、1,4-ブタンジオール、1,5-ペンタンジオール、2,2-ジメチルプロパン-1,3-ジオール、2-ブチル-2-エチルプロパン-1,3-ジオール、2-メチル-2,4-ペンタンジオール、2-エチル-1,3-ヘキサジオール、2-メチル-1,3-プロパンジオール、1,5-ヘキサジオール、1,6-ヘキサジオール、1,8-オクタンジオール、1,10-デカンジオール、1,12-ドデカンジオール、2,2,4,4-テトラメチルシクロブタン-1,3-ジオール、1,3-シクロペンタンジオール、1,2-シクロヘキサジオール、1,3-シクロヘキサジオール、1,4-シクロヘキサジオール、1,2-シクロヘキサジメタノール、1,3-シクロヘキサジメタノール、1,4-シクロヘキサジメタノール、1,4-シクロヘキサジエタノール、イソソルビド、グリセロールモノエステル、グリセロールモノエーテル、トリメチロールプロパンモノエステル、トリメチロールプロパンモノエーテル、ペンタエリスリトールジエステル、ペンタエリスリトールジエーテル、及びこれらのいずれかのアルコキシル化誘導体からなる群から選択される。

【0285】

((Z))が二価アルコールから得られる特定の実施形態において、二価アルコールは、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、テトラエチレングリコール、より高級のポリ(エチレングリコール)、例えば220~約2000g/molの数平均分子量を有するもの、ジプロピレングリコール、トリプロピレングリコール、及びより高級のポリ(プロピレングリコール)、例えば234~約2000g/molの数平均分子量を有するものからなる群から選択される。

【0286】

((Z))が二価アルコールから得られる特定の実施形態において、二価アルコールは、二酸、ジオール、又はヒドロキシ酸からなる群から選択される化合物のアルコキシル化誘導体を含む。特定の実施形態において、アルコキシル化誘導体は、エトキシル化又はプロポキシル化化合物を含む。

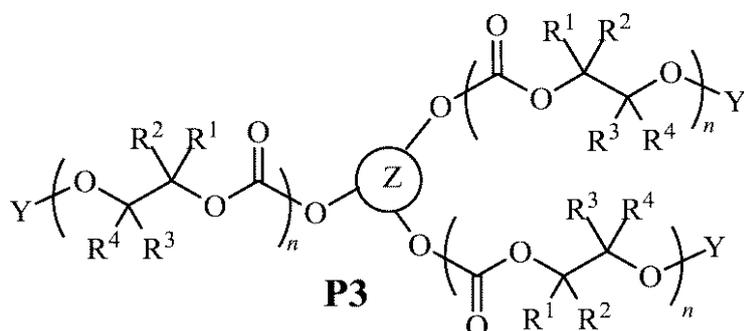
【0287】

((Z))が二価アルコールから得られる特定の実施形態において、二価アルコールは、ポリマージオールを含む。特定の実施形態において、ポリマージオールは、ポリエーテル、ポリエステル、ヒドロキシ末端ポリオレフィン、ジオールとホスゲンから得られるポリカルボナートポリオール(又はその反応性均等物); ポリエーテル-コポリエステル、ポリエーテルポリカルボナート、ポリカルボナート-コポリエステル、ポリオキシメチレンポリマー、及びこれらのいずれかのアルコキシル化類似体からなる群から選択される。特定の実施形態において、ポリマージオールは、約2000g/mol未満の平均分子量を有する。

【0288】

特定の実施形態において、((Z))は、多価アルコールと2個を超えるヒドロキシル基とから得られる。特定の実施形態において、本発明のポリマー組成物中の脂肪族ポリカルボナートは、部分((Z))がトリオールから得られる脂肪族ポリカルボナート鎖を含む。特定の実施形態において、そのような脂肪族ポリカルボナート鎖は、構造P3:

【化25】



10

20

30

40

50

(式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $Y$ 、 $((Z))$ 及び $n$ のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を有する。

【0289】

$((Z))$ がトリオールである特定の実施形態において、トリオールは、グリセロール、1,2,4-ブタントリオール、2-(ヒドロキシメチル)-1,3-プロパンジオール；ヘキサントリオール、トリメチロールプロパン、トリメチロールエタン、トリメチロールヘキサン、1,4-シクロヘキサントリメタノール、ペンタエリスリトールモノエステル、ペンタエリスリトールモノエーテル、及びこれらのいずれかのアルコキシル化類似体からなる群から選択される。特定の実施形態において、アルコキシル化誘導体は、エトキシル化又はプロポキシル化化合物を含む。

10

【0290】

特定の実施形態において、 $((Z))$ は、三官能性カルボン酸及び三官能性ヒドロキシ酸のアルコキシル化誘導体から得られる。特定の実施形態において、アルコキシル化誘導体は、エトキシル化又はプロポキシル化化合物を含む。

【0291】

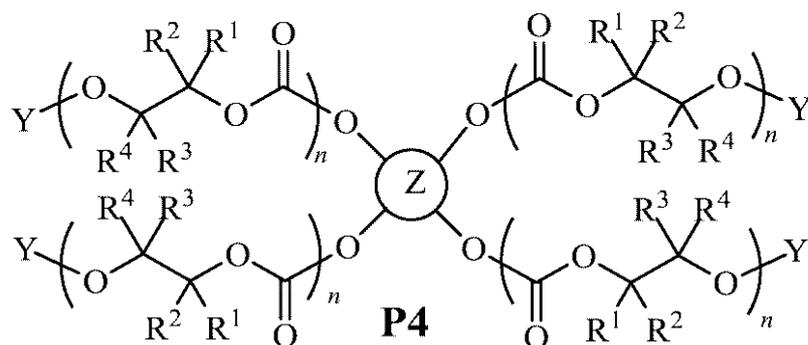
$((Z))$ がポリマートリオールから得られる特定の実施形態において、ポリマートリオールは、ポリエーテル、ポリエステル、ヒドロキシ末端ポリオレフィン、ポリエーテル-コポリエステル、ポリエーテルポリカルボナート、ポリメチレンポリマー、ポリカルボナート-コポリエステル、及びこれらのいずれかのアルコキシル化類似体からなる群から選択される。特定の実施形態において、アルコキシル化ポリマートリオールは、エトキシル化又はプロポキシル化化合物を含む。

20

【0292】

特定の実施形態において、 $((Z))$ は、4つのヒドロキシ基を有する多価アルコールから得られる。特定の実施形態において、本発明のポリマー組成物中の脂肪族ポリカルボナート鎖は、 $((Z))$ がテトラオールから得られる脂肪族ポリカルボナート鎖を含む。特定の実施形態において、本発明のポリマー組成物中の脂肪族ポリカルボナート鎖は、構造P4：

【化26】



30

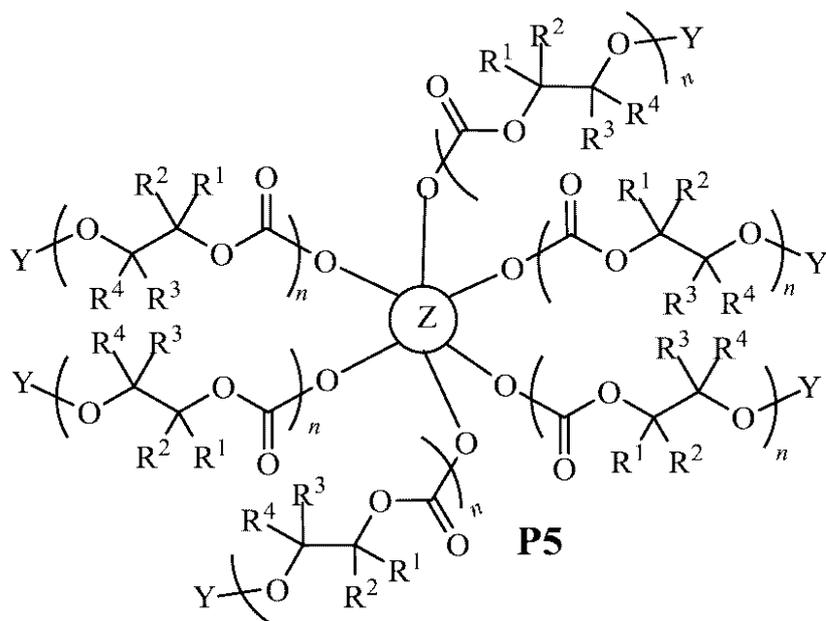
(式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $Y$ 、 $((Z))$ 及び $n$ のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を有する鎖を含む。

40

【0293】

特定の実施形態において、 $((Z))$ は、4つを超えるヒドロキシ基を有する多価アルコールから得られる。特定の実施形態において、 $((Z))$ は、6つのヒドロキシ基を有する多価アルコールから得られる。特定の実施形態において、多価アルコールは、ジペンタエリスリトール、又はそのアルコキシル化類似体である。特定の実施形態において、多価アルコールは、ソルビトール、又はそのアルコキシル化類似体である。特定の実施形態において、本発明のポリマー組成物中の脂肪族ポリカルボナート鎖は、構造P5：

## 【化27】



10

(式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $Y$ 、 $((Z))$ 及び $n$ のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を有する鎖を含む。

20

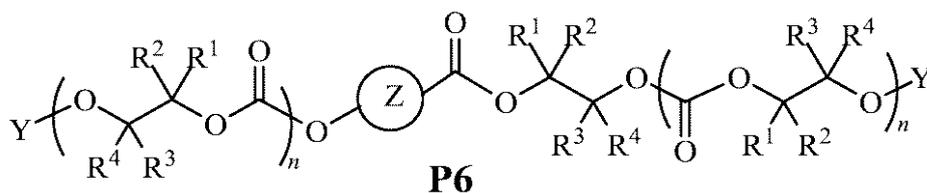
## 【0294】

特定の実施形態において、本発明の脂肪族ポリカルボナートは、二官能鎖(例えば、式P2のポリカルボナート)とより高級の官能基鎖(例えば、式P3~P5の1つ以上のポリカルボナート)との組み合わせを含む。

## 【0295】

特定の実施形態において、 $((Z))$ は、ヒドロキシ酸から得られる。特定の実施形態において、本発明のポリマー組成物中の脂肪族ポリカルボナート鎖は、構造P6:

## 【化28】

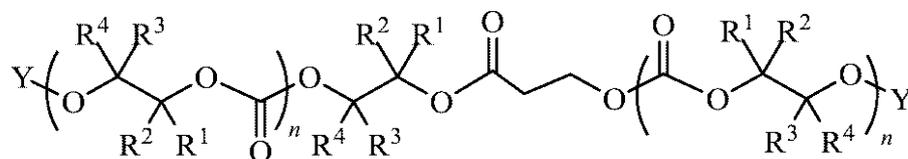


30

(式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、 $R^4$ 、 $Y$ 、 $((Z))$ 及び $n$ のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を有する鎖を含む。そのような例において、 $((Z))$ は、ヒドロキシ酸の炭素含有バックボーンを表すが、 $((Z))$ に隣接するエステル及びカルボナート結合は、ヒドロキシ酸の $-CO_2H$ 基及びヒドロキシ基から得られる。例えば、 $((Z))$ が、3-ヒドロキシプロパン酸から得られた場合には、 $((Z))$ は、 $-CH_2CH_2-$ となり、P6は、以下の構造:

40

## 【化29】



を有する。

## 【0296】

特定の実施形態において、 $((Z))$ は、場合により置換された $C_{2-40}$ ヒドロキシ酸から得られる。特定の実施形態において、 $((Z))$ は、ポリエステルから得られる。

50

特定の実施形態において、そのようなポリエステルは、約 2000 g/mol 未満の分子量を有する。

【0297】

特定の実施形態において、ヒドロキシ酸は、 $\alpha$ -ヒドロキシ酸である。特定の実施形態において、ヒドロキシ酸は、グリコール酸、DL-乳酸、D-乳酸、L-乳酸及びマンデル酸からなる群から選択される。

【0298】

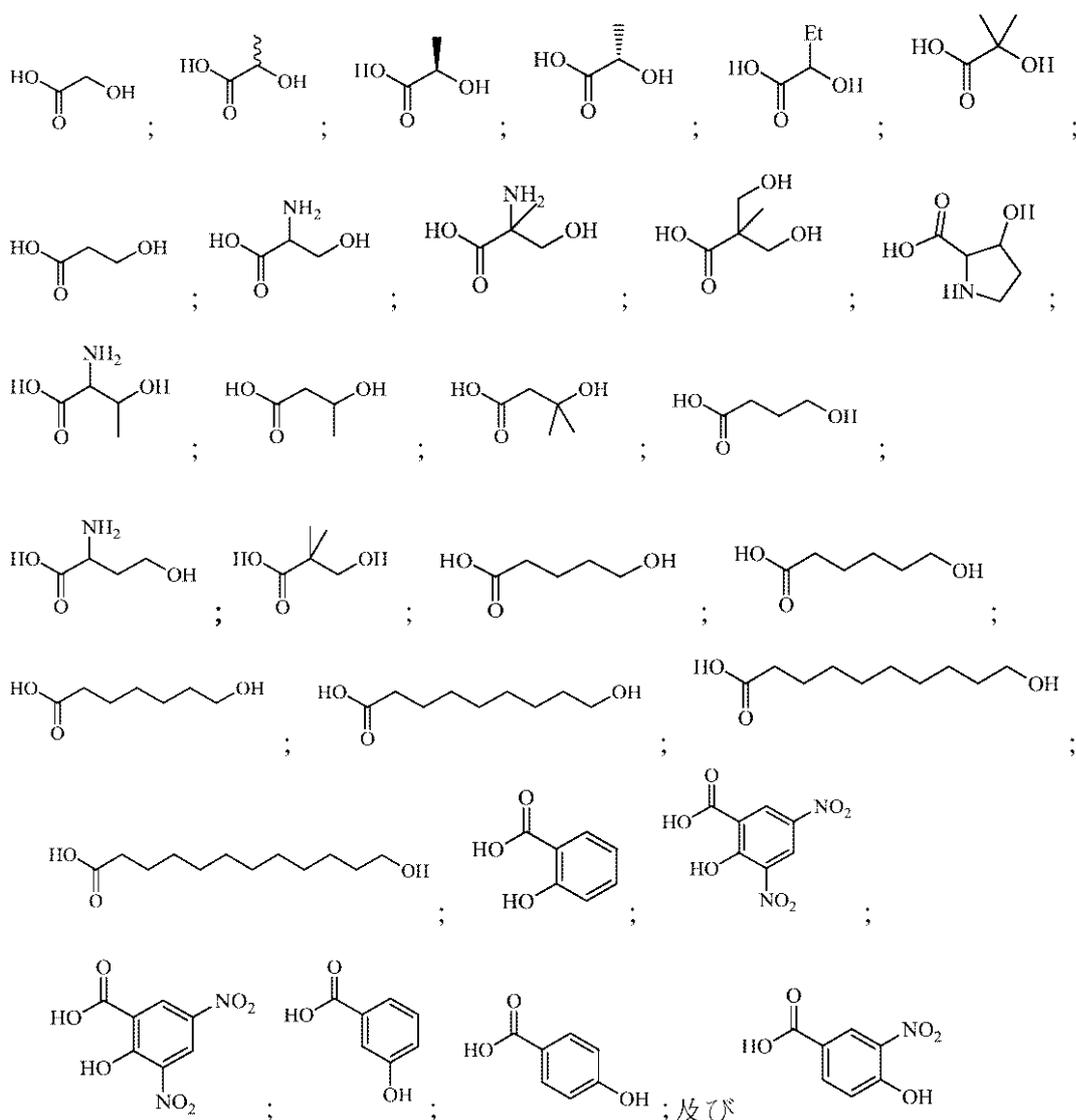
特定の実施形態において、ヒドロキシ酸は、 $\beta$ -ヒドロキシ酸である。特定の実施形態において、ヒドロキシ酸は、3-ヒドロキシプロピオン酸、DL-3-ヒドロキシ酪酸、D-3-ヒドロキシ酪酸、L-3-ヒドロキシ酪酸、DL-3-ヒドロキシ吉草酸、D-3-ヒドロキシ吉草酸、L-3-ヒドロキシ吉草酸、サリチル酸及びサリチル酸誘導体からなる群から選択される。

【0299】

特定の実施形態において、ヒドロキシ酸は、 $\gamma$ -ヒドロキシ酸である。特定の実施形態において、ヒドロキシ酸は、場合により置換された  $C_{3-20}$  脂肪族  $\gamma$ -ヒドロキシ酸及びオリゴマーエステルからなる群から選択される。

【0300】

特定の実施形態において、ヒドロキシ酸は、  
【化30】

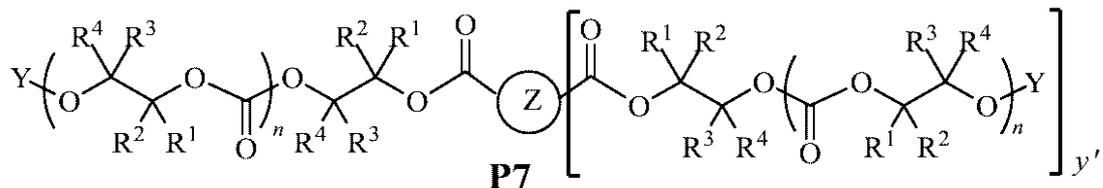


からなる群から選択される。

## 【0301】

特定の実施形態において、((Z))は、ポリカルボン酸から得られる。特定の実施形態において、本発明のポリマー組成物中の脂肪族ポリカルボナート鎖は、構造P7：

## 【化31】



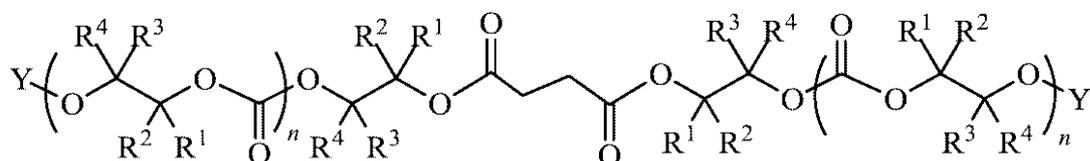
10

(式中、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、Y、((Z))及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載され、y'は、1~5の整数である)を有する鎖を含む。

## 【0302】

脂肪族ポリカルボナート鎖が構造P7を有する実施形態において、((Z))は、ポリカルボン酸の炭素含有バックボーン(又はシュウ酸の場合には共有結合)を表し、((Z))に隣接するエステル基は、ポリカルボン酸の-CO<sub>2</sub>H基から得られる。例えば、((Z))が、コハク酸(HO<sub>2</sub>CCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>CO<sub>2</sub>H)から得られる場合には、((Z))は、-CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-となり、P7は、以下の構造：

## 【化32】



20

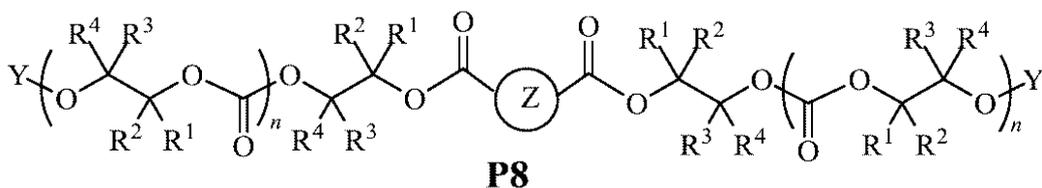
(式中、R<sup>1</sup>、R<sup>2</sup>、R<sup>3</sup>、R<sup>4</sup>、Y及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を有する。

## 【0303】

特定の実施形態において、((Z))は、ジカルボン酸から得られる。特定の実施形態において、本発明のポリマー組成物中の脂肪族ポリカルボナート鎖は、構造P8：

30

## 【化33】



を有する鎖を含む

## 【0304】

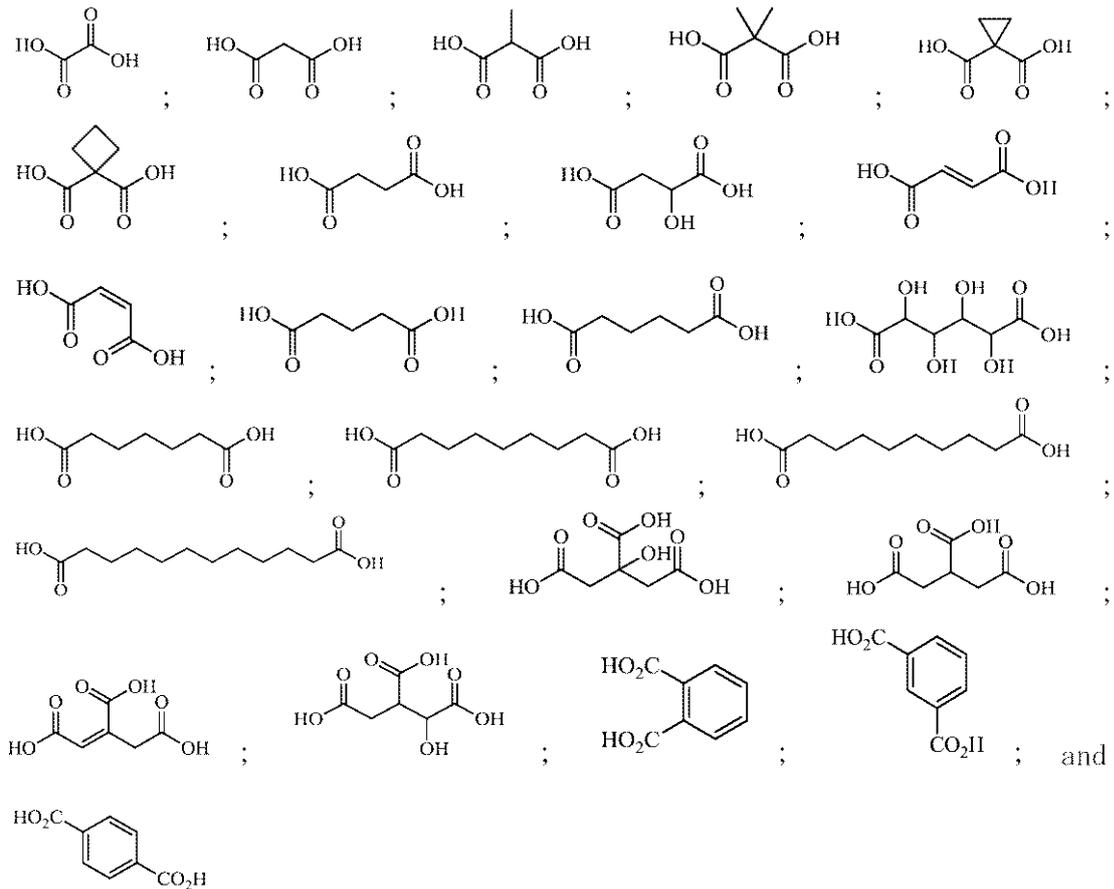
特定の実施形態において、((Z))は、フタル酸、イソフタル酸、テレフタル酸、マレイン酸、コハク酸、マロン酸、グルタル酸、アジピン酸、ピメリン酸、スベリン酸、及びアゼライン酸からなる群から選択される。

40

## 【0305】

特定の実施形態において、((Z))は、

## 【化34】



10

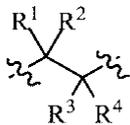
20

からなる群から選択される。

## 【0306】

特定の実施形態において、本明細書内の構造における各

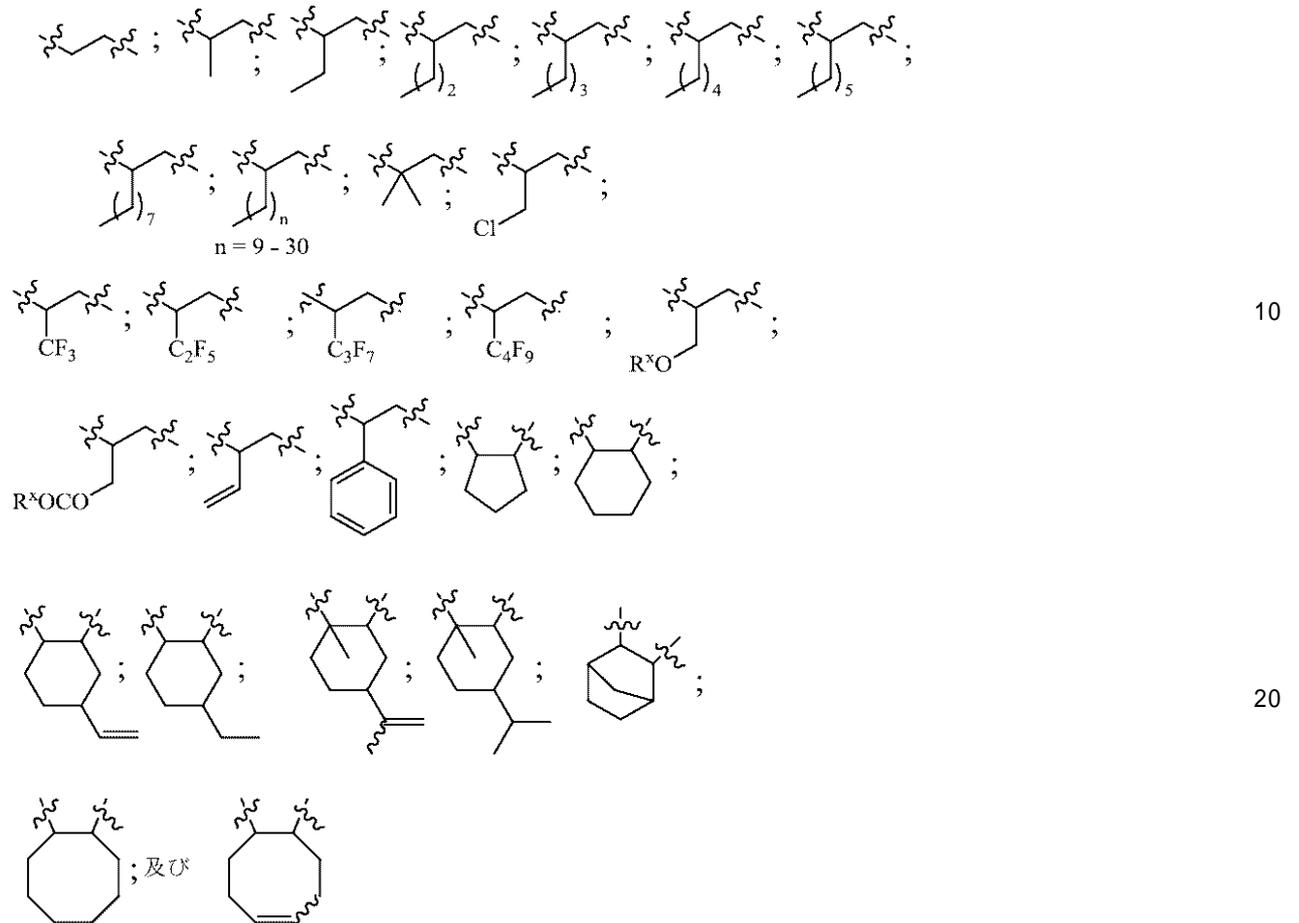
## 【化35】



は、独立して

30

## 【化36】

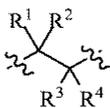


(式中、各  $\text{R}^x$  は、独立して、 $\text{C}_{2-20}$  脂肪族、 $\text{C}_{2-20}$  ヘテロ脂肪族、3 ~ 14 員炭素環、6 ~ 10 員アリール、5 ~ 10 員ヘテロアリール、及び3 ~ 12 員複素環からなる群から選択される、場合により置換された基である) からなる群から選択される。

## 【0307】

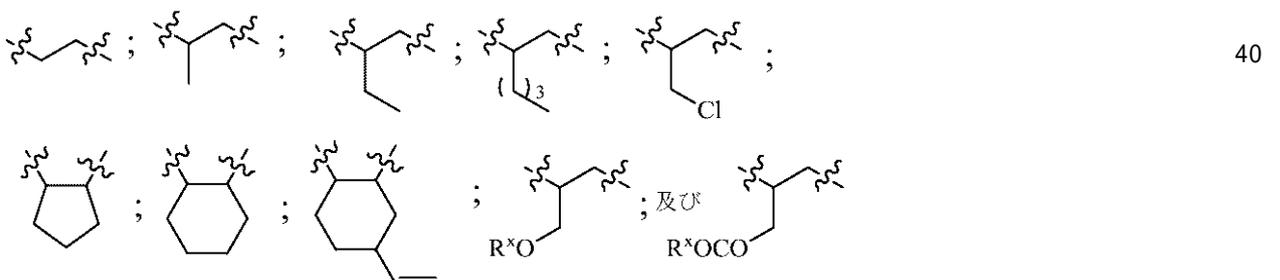
特定の実施形態において、本発明の構造における各

## 【化37】



は、独立して

## 【化38】



(式中、各  $\text{R}^x$  は、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される) からなる群から選択される。

## 【0308】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボネート鎖は、

10

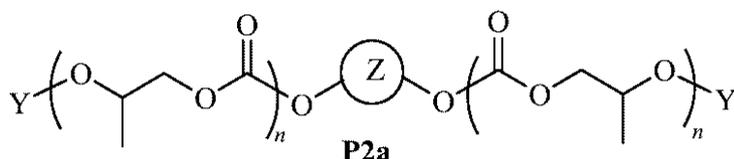
20

30

40

50

【化39】



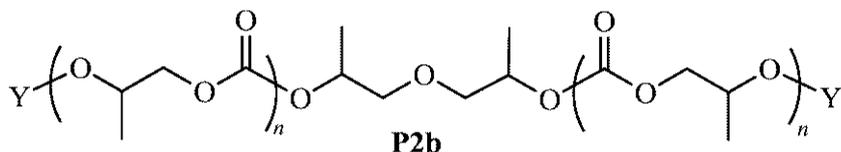
(式中、((Z))、-Y、及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0309】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、

10

【化40】



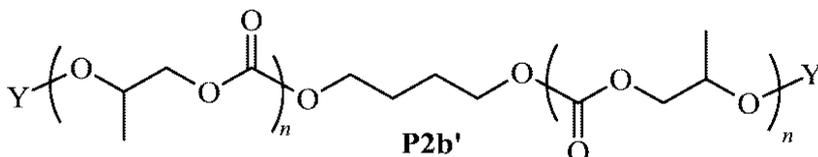
(式中、-Y及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0310】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、

20

【化41】



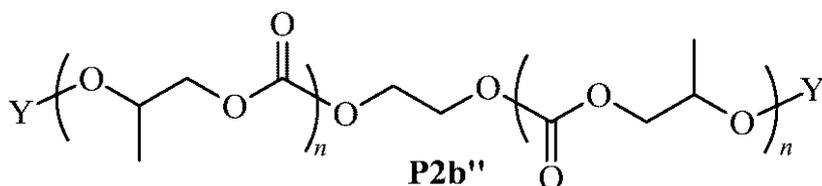
(式中、-Y及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0311】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、

30

【化42】



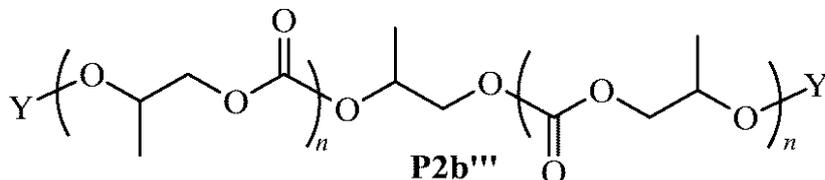
(式中、-Y及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0312】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、

40

【化43】

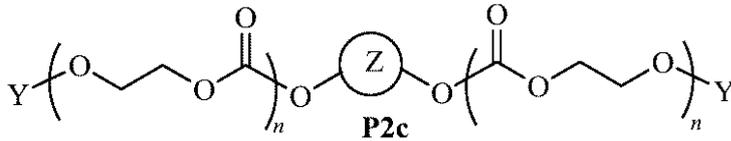


(式中、-Y及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

50

## 【0313】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化44】

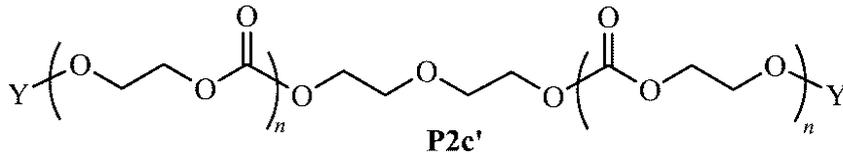


(式中、(Z)、-Y、及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

10

## 【0314】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化45】

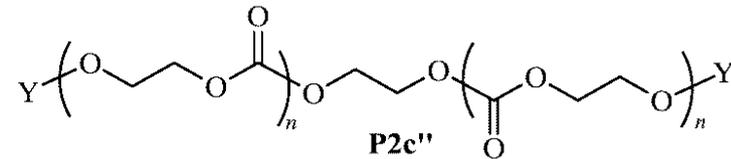


(式中、-Y及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

20

## 【0315】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化46】

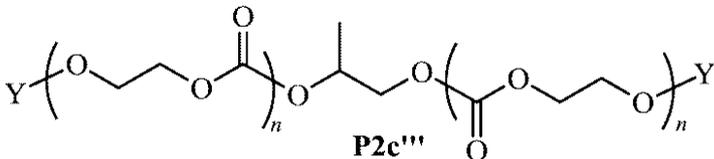


(式中、-Y及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

30

## 【0316】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化47】

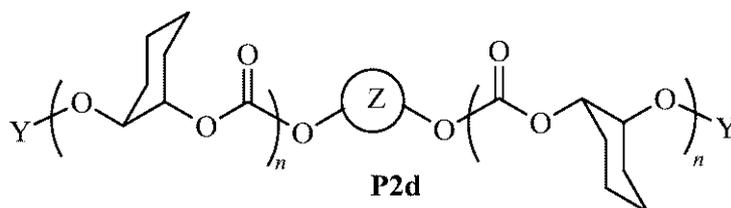


(式中、-Y及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

40

## 【0317】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化48】

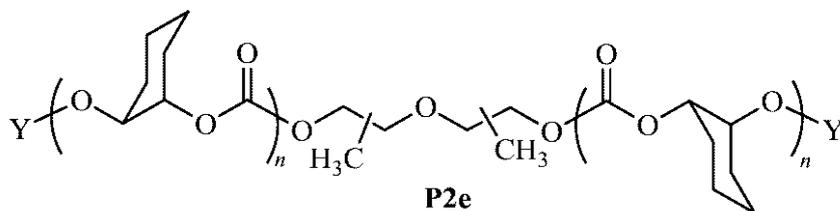


50

(式中、( ( Z ) )、- Y、及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0318】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化49】

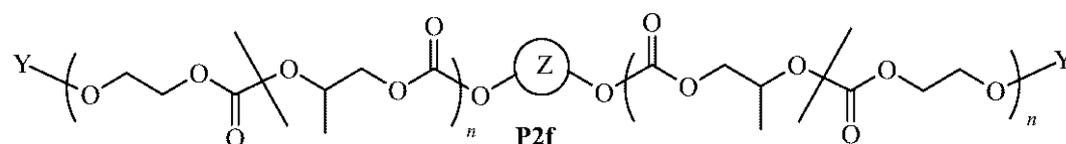


10

(式中、- Y 及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0319】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化50】

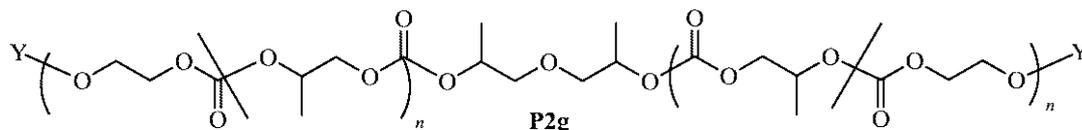


20

(式中、( ( Z ) )、- Y、及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0320】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化51】

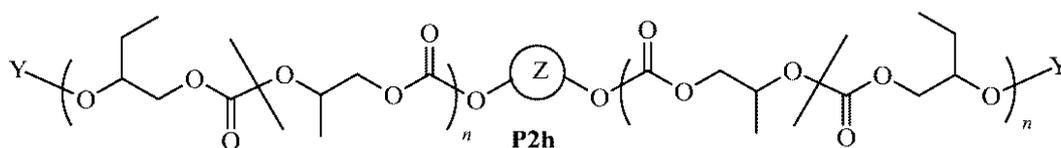


30

(式中、- Y 及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0321】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化52】

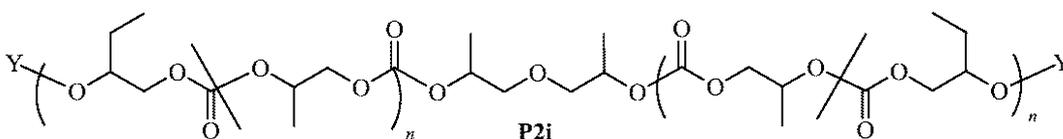


40

(式中、( ( Z ) )、- Y、及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0322】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化53】

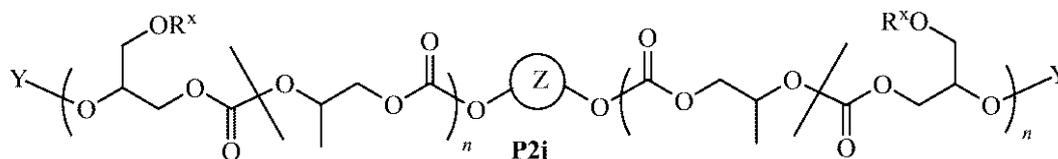


50

(式中、- Y 及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0323】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化54】

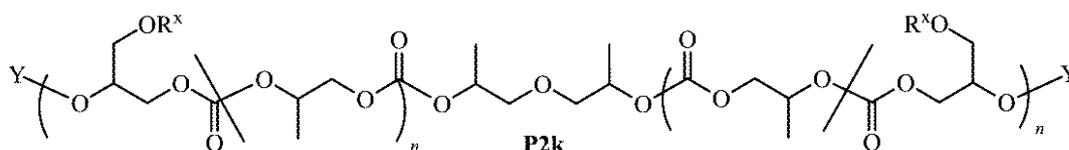


10

(式中、((Z))、- Y、R<sup>x</sup> 及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0324】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化55】

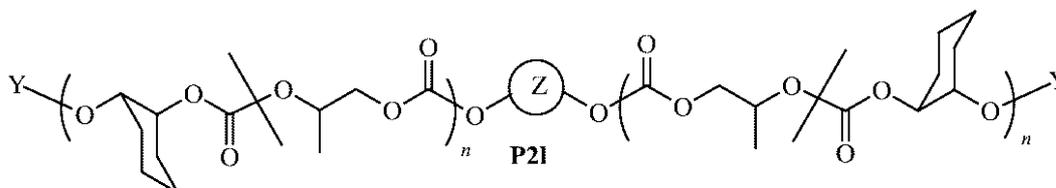


20

(式中、- Y、R<sup>x</sup> 及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0325】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化56】

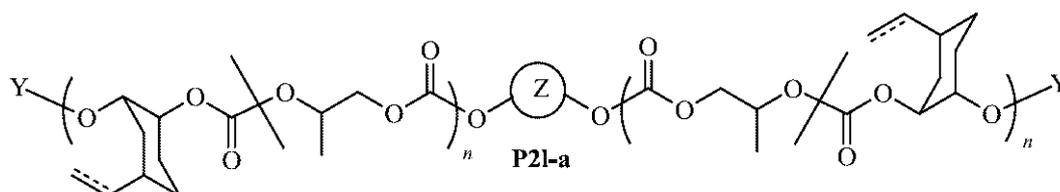


30

(式中、((Z))、- Y、及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0326】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化57】



40

(式中、((Z))、- Y、及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載され；各

【化58】

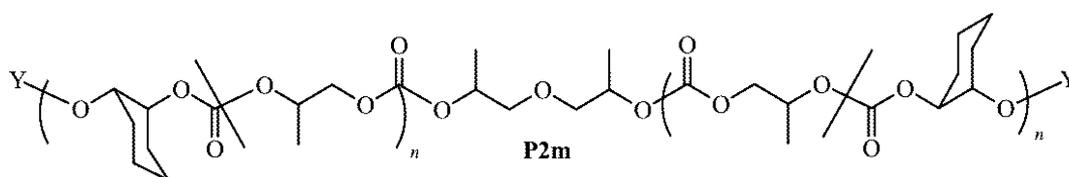
====

は、独立して、単結合又は二重結合を表す)を含む。

【0327】

50

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化59】

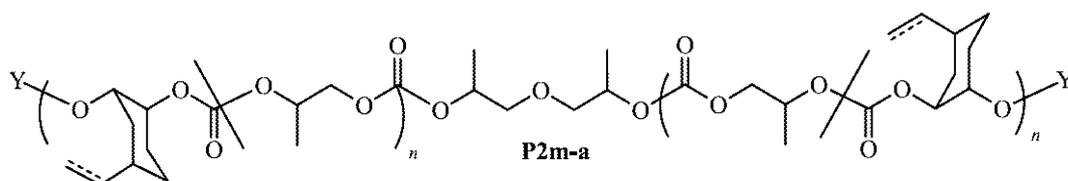


(式中、- Y 及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される) を含む。

10

【0328】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化60】



(式中、- Y、

20

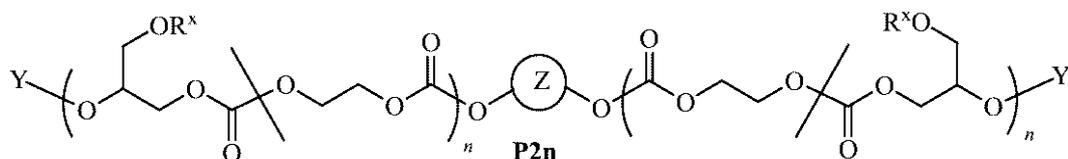
【化61】

====

及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される) を含む。

【0329】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化62】

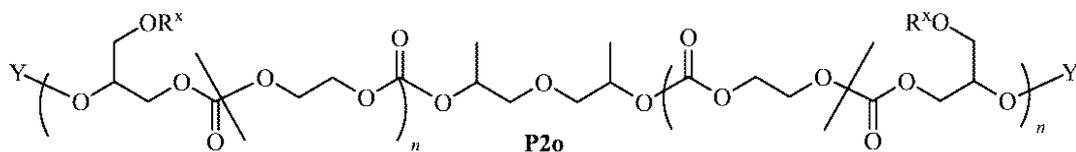


30

(式中、( ( Z ) )、R<sup>x</sup>、- Y、及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される) を含む。

【0330】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化63】



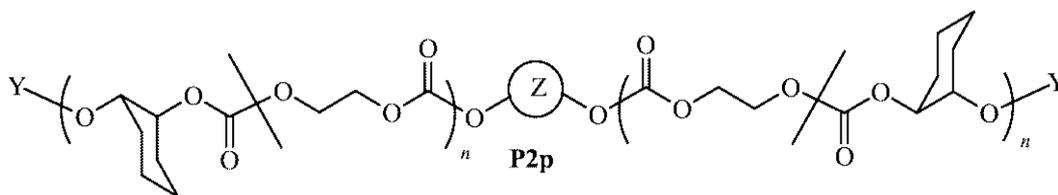
40

(式中、- Y、R<sup>x</sup>、及び n のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される) を含む。

【0331】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、

## 【化64】



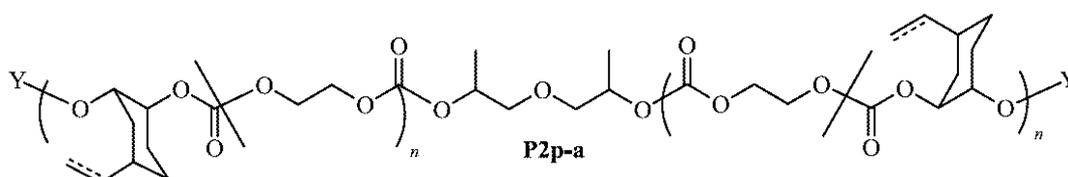
(式中、(Z)、-Y、及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

## 【0332】

10

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、

## 【化65】



(式中、-Y、

## 【化66】

20

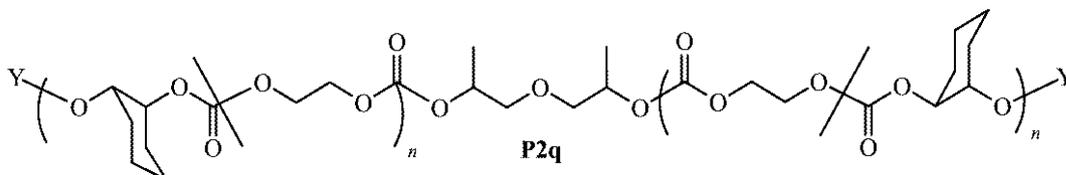
====

及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

## 【0333】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、

## 【化67】



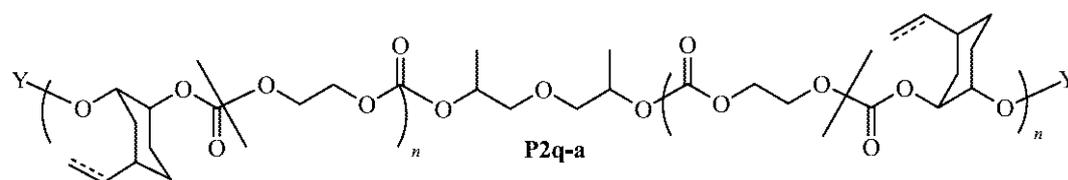
30

(式中、-Y及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

## 【0334】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、

## 【化68】



40

(式中、-Y、

## 【化69】

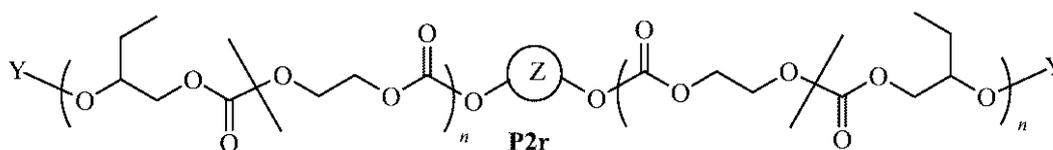
====

及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

## 【0335】

50

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化70】

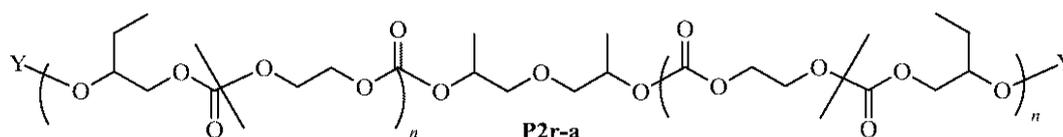


(式中、(Z)、-Y、及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0336】

10

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナート鎖は、  
【化71】



(式中、-Y及びnのそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を含む。

【0337】

20

構造P2a、P2c、P2d、P2f、P2h、P2j、P2l、P2l-a、P2n、P2p、及びP2rを有するポリカルボナートにおける特定の実施形態において、(Z)は、エチレングリコール、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、1,3-プロパンジオール、1,4-ブタンジオール、ヘキシレングリコール、1,6-ヘキサジオール、プロピレングリコール、ジプロピレングリコール、トリプロピレングリコール、及びこれらのいずれかのアルコキシ化誘導体からなる群から選択される。

【0338】

2つ以上のエポキシドから得られる繰返し単位を含むポリカルボナート、例えば先に示された構造P2f~P2rにより表されるもの場合、描かれた構造が、明示的に示されていない位置異性体又はレジオアイソマーの混合物を表し得ることが、理解されなければならない。例えばポリカルボナート鎖のいずれかの末端基に隣接するポリマー繰返し単位は、コポリマーを含む2つのエポキシドのいずれか一方から、又は2つのエポキシドの一方だけから得ることができる。つまり該ポリマーは、末端基に結合した特定の繰返し単位と共に描くことができるが、末端の繰返し単位は、2つのエポキシドのいずれかから得ることができる。所定のポリマー組成物は、可能性のある全ての混合物を様々な割合で含むことができる。これらの末端基の割合は、重合で用いられる異なるエポキシドの割合、用いられる触媒の構造、用いられる反応条件(即ち、温度、CO<sub>2</sub>圧など)に加え、反応成分を添加するタイミングなど、様々な因子による影響を受ける可能性がある。同様に、上記の図は、置換されたエポキシドから得られた繰返し単位について定義された位置化学を示すことができるが、該ポリマー組成物は、幾つかの例において、レジオアイソマーの混合物を含む。所定の重合の位置選択性は、用いられる触媒の構造及び利用される反応条件をはじめとし、数多くの因子による影響を受け得る。明確に言えば、これは、上記の構造P2rにより表された組成物が以下の図解に示された複数の化合物の混合物を含み得ることを意味している。この図解は、異性体をポリマーP2rについて図式的に示しており、鎖の描写の下の構造は、連鎖移動剤に隣接するモノマー単位及びポリマー主鎖の各側にある末端基にとって可能な各レジオアイソマー及び位置異性体を示している。該ポリマーの各末端基は、独立して、左又は右に示された基から選択することができ、連鎖移動剤及びそれに隣接するモノマー単位を含むポリマーの中心部分は、独立して、図示された基から選択することができる。特定の実施形態において、該ポリマー組成物は、これらの可能な組み合わせ全ての混合物を含む。他の実施形態において、該ポリマー組成物は、これらの1

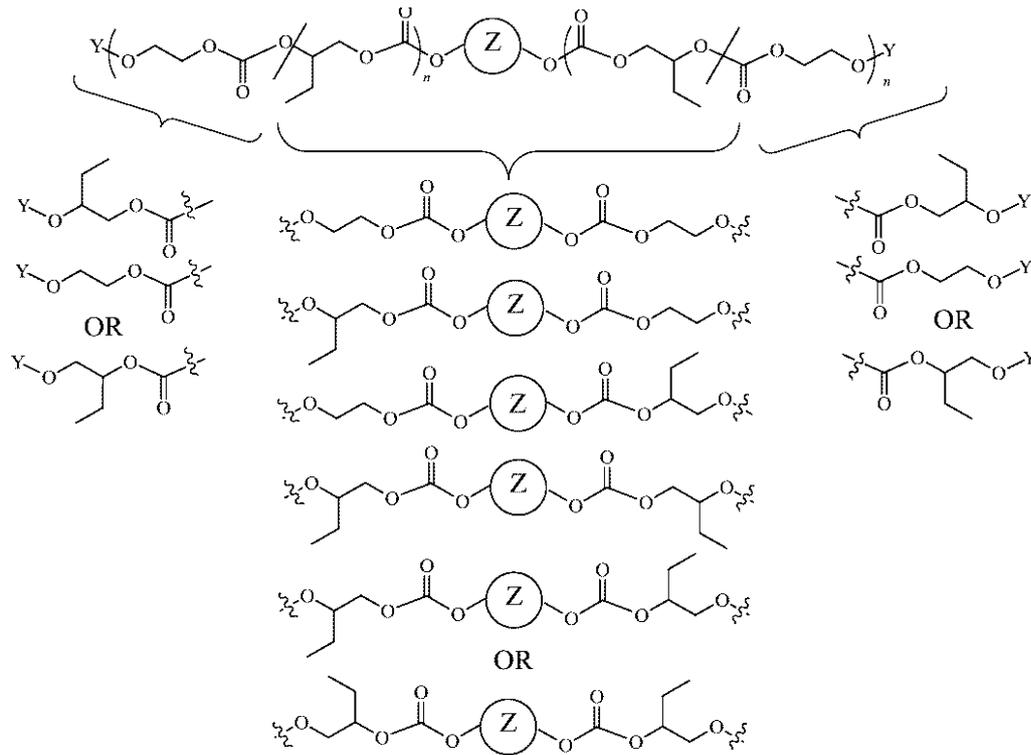
30

40

50

つ以上を多量に含む。

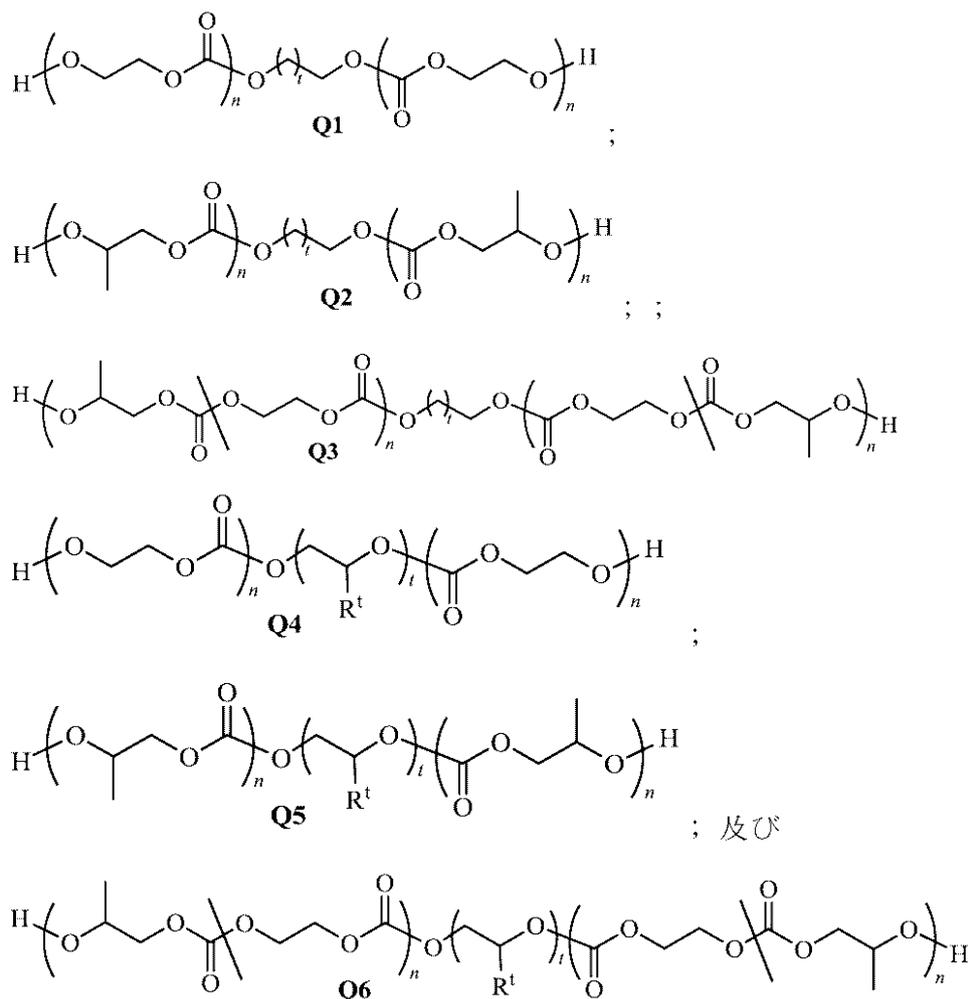
【化72】



【0339】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボネートポリマーは、Q1、Q2、Q3、Q4、Q5、Q6、及びこれらの任意の2つ以上の混合物からなる群から選択される。

## 【化 7 3】



10

20

(式中、tは、1～12の整数であり、R<sup>t</sup>は、独立して、各出現において - H又は - C H<sub>3</sub>である)

30

## 【0340】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナートポリオールは、

約500g/mol～約3,000g/molの平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも85%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q1で示されるポリ(エチレンカルボナート)；

約500g/molの平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも85%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q1で示されるポリ(エチレンカルボナート)；

約1000g/molの平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも85%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q1で示されるポリ(エチレンカルボナート)；

40

約2,000g/molの平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも85%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q1で示されるポリ(エチレンカルボナート)；

約3,000g/molの平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも85%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q1で示されるポリ(エチレンカルボナート)；

約500g/mol～約3,000g/molの平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも95%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q2で示されるポリ(プロピレンカルボナート)；

50

約 500 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 95% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q2 で示されるポリ(プロピレンカルボナート)；

約 1,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 95% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q2 で示されるポリ(プロピレンカルボナート)；

約 2,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 95% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q2 で示されるポリ(プロピレンカルボナート)；

約 3,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 95% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q2 で示されるポリ(プロピレンカルボナート)；

10

約 500 g/mol ~ 約 3,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 90% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q3 で示されるポリ(エチレン-コ-プロピレンカルボナート)；

約 500 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 90% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q3 で示されるポリ(エチレン-コ-プロピレンカルボナート)；

約 1,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 90% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q3 で示されるポリ(エチレン-コ-プロピレンカルボナート)；

20

約 2,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 90% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q3 で示されるポリ(エチレン-コ-プロピレンカルボナート)；

約 3,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 90% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q3 で示されるポリ(エチレン-コ-プロピレンカルボナート)；

約 500 g/mol ~ 約 3,000 g/mol の数平均分子量(例えば、各 n は、約 4 ~ 約 16 である)、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 95% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q4 で示されるポリ(エチレンカルボナート)；

30

約 500 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 85% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q4 で示されるポリ(エチレンカルボナート)；

約 1,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 85% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q4 で示されるポリ(エチレンカルボナート)；

約 2,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 85% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q4 で示されるポリ(エチレンカルボナート)；

40

約 3,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 85% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q4 で示されるポリ(エチレンカルボナート)；

約 500 g/mol ~ 約 3,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 95% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q5 で示されるポリ(プロピレンカルボナート)；

約 500 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも 95% のカルボナート結合、及び少なくとも 98% の -OH 末端基を有する式 Q5 で示されるポリ(プロピレンカルボナート)；

約 1,000 g/mol の数平均分子量、約 1.25 未満の多分散性指数、少なくとも

50

95%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q5で示されるポリ(プロピレンカルボナート)；

約2,000g/molの数平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも95%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q5で示されるポリ(プロピレンカルボナート)；

約3,000g/molの数平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも95%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q5で示されるポリ(プロピレンカルボナート)；

約500g/mol～約3,000g/molの数平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも90%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q6で示されるポリ(エチレン-コ-プロピレンカルボナート)；

約500g/molの数平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも90%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q6で示されるポリ(エチレン-コ-プロピレンカルボナート)；

約1,000g/molの数平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも90%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q6で示されるポリ(エチレン-コ-プロピレンカルボナート)；

約2,000g/molの数平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも90%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q6で示されるポリ(エチレン-コ-プロピレンカルボナート)；

約3,000g/molの数平均分子量、約1.25未満の多分散性指数、少なくとも95%のカルボナート結合、及び少なくとも98%の-OH末端基を有する式Q6で示されるポリ(エチレン-コ-プロピレンカルボナート)；

からなる群から選択される。

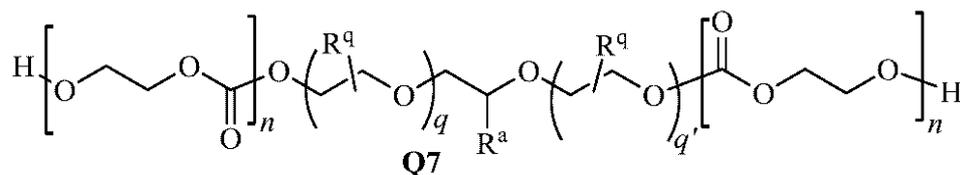
#### 【0341】

特定の実施形態において、組み込まれた連鎖移動剤((Z))は、ポリマージオール又はより高級の多価アルコールから得られた部分である。特定の実施形態において、そのようなポリマーアルコールは、ポリエーテル又はポリエステルポリオールである。特定の実施形態において、((Z))は、エチレングリコール若しくはプロピレングリコール繰返し単位(-OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>O-、又は-OCH<sub>2</sub>CH(CH<sub>3</sub>)O-)又はこれらの組み合わせを含むポリエーテルポリマーである。特定の実施形態において、((Z))は、ジオールと二酸との反応生成物を含むポリエステルポリマー、又はラク톤の開環重合から得られる材料である。

#### 【0342】

((Z))がポリエーテルジオールを含む特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナートポリオールは、構造Q7：

#### 【化74】



(式中、

R<sup>q</sup>は、該ポリマー内での各出現においてに独立して、-H又は-CH<sub>3</sub>であり；

R<sup>a</sup>は、-H又は-CH<sub>3</sub>であり；

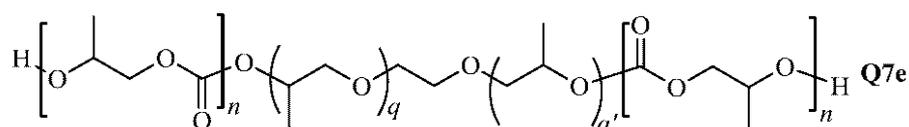
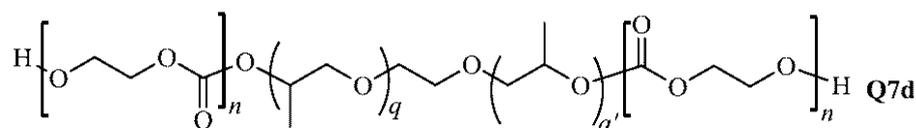
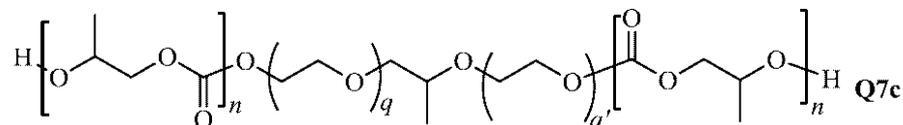
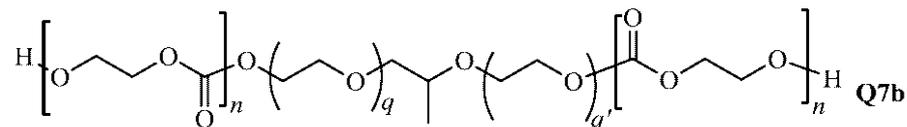
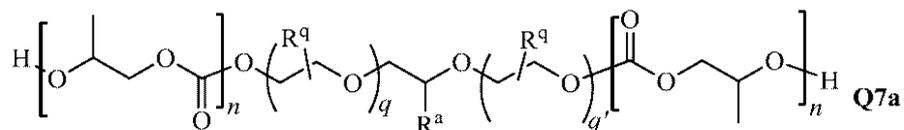
q及びq'は、独立して、約2～約40の整数であり；

nは、上記、本明細書の実施例、及び実施形態に定義された通りである)を有する。

#### 【0343】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナートポリオールは、

## 【化75】



(式中、 $R^a$ 、 $R^q$ 、 $q$ 、 $q'$ 、及び $n$ のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)からなる群から選択される。

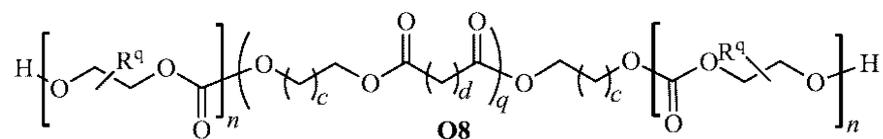
## 【0344】

該脂肪族ポリカルボナートポリオールが構造Q7に従う化合物を含む特定の実施形態において、部分((Z))は、市販のポリエーテルポリオール、例えば典型的にはポリウレタンフォーム組成物の形成に用いられるものなどから得られる。

## 【0345】

((Z))がポリエステルジオールを含む特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナートポリオールは、構造Q8:

## 【化76】



(式中、

$c$ は、ポリマー鎖における各出現において独立して、0~6の整数であり；

$d$ は、ポリマー鎖における各出現において独立して、1~11の整数であり；

$R^q$ 、 $n$ 、 $q$ 、及び $q'$ のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される)を有する。

## 【0346】

特定の実施形態において、脂肪族ポリカルボナートポリオールは、

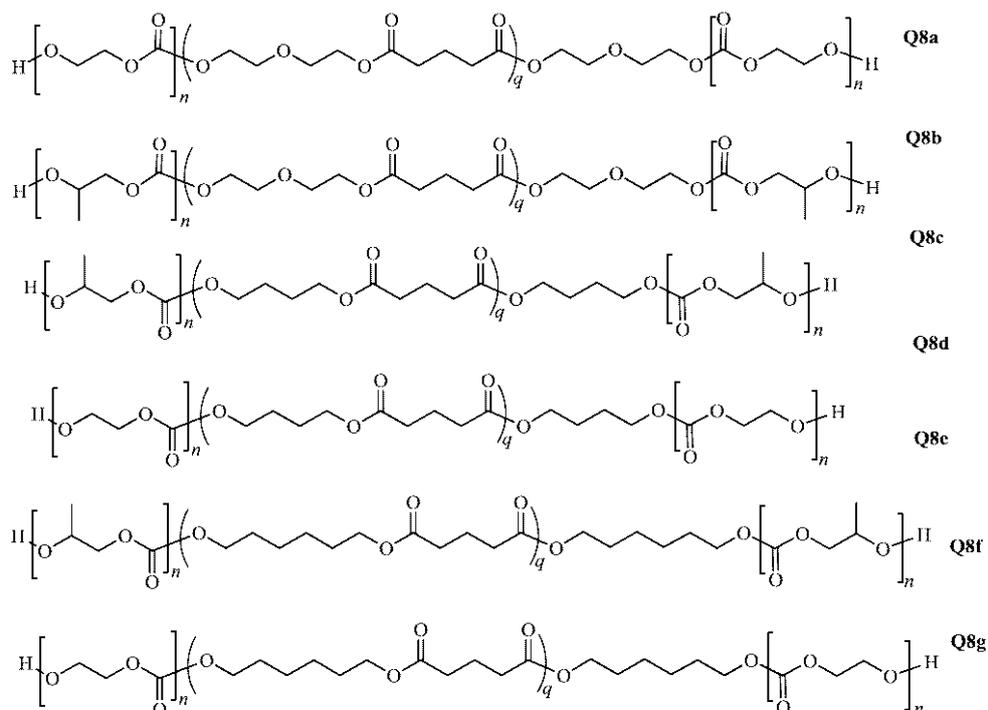
10

20

30

40

## 【化 7 7】



10

20

( n 及び q のそれぞれは、先に定義された通りであり、本明細書内の分類及び下位分類に記載される ) からなる群から選択される。

## 【 0 3 4 7】

脂肪族ポリカルボナートポリオールが構造 Q 8 に従う化合物を含む特定の実施形態において、部分 ( Z ) は、市販のポリエステルポリオール、例えば典型的にはポリウレタンフォーム組成物の形成に用いられるものなどから得られる。

## 【 0 3 4 8】

別表 B : イソシアネート試薬

このセクションは、本発明の方法及び組成物において利用するポリイソシアネートのいくつかを記載する。本発明の組成物は、イソシアネート試薬またはこれらの反応生成物を含む。これらのイソシアネート試薬の目的は、脂肪族ポリカーボネートポリオールにおける反応性末端基と反応して、鎖延長及び/または架橋を通して、より高分子量の構造を形成することである。

30

## 【 0 3 4 9】

ポリウレタン合成の分野は、かなり進んでおり、非常に多数のイソシアネート及び関係するポリウレタン前駆体が当該分野において公知であり、商業的に入手可能である。本明細書のこのセクションは、本発明のある一定の実施形態において用いられるのに好適なイソシアネートを記載しているが、本開示の教示に沿って代替のイソシアネートを用いて本発明の範囲内の事項のさらなる組成物を処方することは、ポリウレタン処方物の当業者の能力の範囲内であることが理解されるべきである。好適なイソシアネート化合物及び関係する方法の記載は、各々の全体が参照により本明細書に組み込まれる Chemistry and Technology of Polyols for Polyurethanes Ionescu, Mihail 2005 (ISBN 978-1-84735-035-0), and H. Ulrich, "Urethane Polymers" Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology, 1997に見出され得る。

40

## 【 0 3 5 0】

ある一定の実施形態において、イソシアネート試薬は、1分子当たり2個以上のイソシアネート基を含む。ある一定の実施形態において、イソシアネート試薬は、ジイソシアネートである。他の実施形態において、イソシアネート試薬は、より高次のポリイソシアネート、例えば、トリイソシアネート、テトライソシアネート、イソシアネートポリマーまたはオリゴマーなどである。ある一定の実施形態において、イソシアネート試薬は、脂肪

50

族ポリイソシアネートまたは脂肪族ポリイソシアネートの誘導体もしくはオリゴマーである。他の実施形態において、イソシアネートは、芳香族ポリイソシアネートまたは芳香族ポリイソシアネートの誘導体もしくはオリゴマーである。ある一定の実施形態において、組成物は、上記タイプのイソシアネートのいずれか2つ以上の混合物を含んでよい。

【0351】

ある一定の実施形態において、本発明の新規の材料の処方物において用いられるイソシアネート成分は、2以上の官能価を有する。ある一定の実施形態において、本発明材料のイソシアネート成分は、所与の用途に関して特定の官能価数を達成するように処方された、ジイソシアネートと高次のイソシアネートとの混合物を含む。ある一定の実施形態において、本発明組成物が軟質フォームまたは軟質エラストマーである場合、使用されるイソシアネートは、約2の官能価を有する。ある一定の実施形態において、かかるイソシアネートは、約2~約2.7の官能価を有する。ある一定の実施形態において、かかるイソシアネートは、約2~約2.5の官能価を有する。ある一定の実施形態において、かかるイソシアネートは、約2~約2.3の官能価を有する。ある一定の実施形態において、かかるイソシアネートは、約2~約2.2の官能価を有する。

10

【0352】

他の実施形態において、本発明組成物が硬質フォームまたは熱可塑性である場合、使用されるイソシアネートは、2超の官能価を有する。ある一定の実施形態において、かかるイソシアネートは、約2.3~約4の官能価を有する。ある一定の実施形態において、かかるイソシアネートは、約2.5~約3.5の官能価を有する。ある一定の実施形態において、かかるイソシアネートは、約2.6~約3.1の官能価を有する。ある一定の実施形態において、かかるイソシアネートは、約3の官能価を有する。

20

【0353】

ある一定の実施形態において、イソシアネート試薬は、以下からなる群から選択される：1,6-ヘキサメチルアミンジイソシアネート(HDI)、イソホロンジイソシアネート(IPDI)、4,4'-メチレン-ビス(シクロヘキシルイソシアネート)(H<sub>12</sub>MDI)、2,4-トルエンジイソシアネート(TDI)、2,6-トルエンジイソシアネート(TDI)、ジフェニルメタン-4,4'-ジイソシアネート(MDI)、ジフェニルメタン-2,4'-ジイソシアネート(MDI)、キシリレンジイソシアネート(XDI)、1,3-ビス(イソシアナトメチル)シクロヘキササン(H6-XDI)、2,2,4-トリメチルヘキサメチレンジイソシアネート、2,4,4-トリメチルヘキサメチレンジイソシアネート(TMDI)、m-テトラメチルキシリレンジイソシアネート(TMXDI)、p-テトラメチルキシリレンジイソシアネート(TMXDI)、イソシアナトメチル-1,8-オクタン(ictane)ジイソシアネート(TIN)、トリフェニルメタン-4,4',4''-トリイソシアネート、トリス(p-イソシアナトメチル)チオサルフェート、1,3-ビス(イソシアナトメチル)ベンゼン、1,4-テトラメチレンジイソシアネート、トリメチルヘキサジイソシアネート、1,6-ヘキサメチレンジイソシアネート、1,4-シクロヘキシルジイソシアネート、リジンジイソシアネート、及びこれらのいずれか2つ以上の混合物。

30

【0354】

本発明のある一定の実施形態に好適なイソシアネートは、種々の商標で市販されている。好適な市販のイソシアネートの例として、Desmodur(登録商標)(バイエルマテリアルサイエンス)、Tolonate(登録商標)(Perstorp)、Take nate(登録商標)(タケダ)、Vestanat(登録商標)(Evonik)、Desmotherm(登録商標)(バイエルマテリアルサイエンス)、Bayhydur(登録商標)(バイエルマテリアルサイエンス)、Mondur(バイエルマテリアルサイエンス)、Suprasec(Huntsman Inc.)、Lupranate(登録商標)(BASF)、Trixene(Baxenden)、Hartben(登録商標)(Benasedo)、Ucopol(登録商標)(Sapici)、及びBas onat(登録商標)(BASF)で販売されている材料が挙げられる。これらの商標は

40

50

、それぞれ、種々のグレード及び処方物において利用可能な種々のイソシアネート材料を包含する。特定の用途のためのポリウレタン組成物を生成するための試薬として好適な市販のイソシアネート材料の選択は、上記供給者によって供給される製品データシートに付与された情報に沿って本特許出願の教示及び開示を用いるポリウレタン技術の当業者の能力の範囲内である。

## 【0355】

本発明のある一定の実施形態に好適なさらなるイソシアネートは、商標 Lupranate (登録商標) (BASF) で販売されている。ある一定の実施形態において、イソシアネートは、表 1 に示される材料からなる群から選択される：

## 【表 1 a】

製品	説明	% NCO	名目上の官能価
Lupranate M	4,4' MDI	33.5	2
Lupranate MS	4,4' MDI	33.5	2
Lupranate MI	2,4' および 4,4' -MDI のブレンド	33.5	2
Lupranate LP30	Liquid Pure 4,4' MDI	33.1	2
Lupranate 227	モノマー性/変性 MDI ブレンド	32.1	2
<b>カルボシイミド変性 MDI</b>			
Lupranate 5143	カルボシイミド変性 4,4' MDI	29.2	2.2
Lupranate MM103	カルボシイミド変性 4,4' MDI	29.5	2.2
Lupranate 219	カルボシイミド変性 4,4' MDI	29.2	2.2
Lupranate 81	カルボシイミド変性 MDI	29.5	2.2
Lupranate 218	カルボシイミド変性 MDI	29.5	2.2
<b>ポリマー性 MDI (PDMI)</b>			
Lupranate M10	低官能価ポリマー性	31.7	2.2
Lupranate R2500U	ポリマー性 MDI 変形体	31.5	2.7
Lupranate M20S	中官能価ポリマー性	31.5	2.7
Lupranate M20FB	中官能価ポリマー性	31.5	2.7
Lupranate M70L	高官能価ポリマー性	31	3
Lupranate M200	高官能価ポリマー性	30	3.1
<b>ポリマー性 MDI ブレンドおよび誘導体</b>			
Lupranate 241	低官能価ポリマー性	32.6	2.3
Lupranate 230	低粘度ポリマー性	32.5	2.3
Lupranate 245	低粘度ポリマー性	32.3	2.3
Lupranate TF2115	中官能価ポリマー性	32.3	2.4
Lupranate 78	中官能価ポリマー性	32	2.3
Lupranate 234	低官能価ポリマー性	32	2.4
Lupranate 273	低粘度ポリマー性	32	2.5
Lupranate 266	低粘度ポリマー性	32	2.5
Lupranate 261	低粘度ポリマー性	32	2.5
Lupranate 255	低粘度ポリマー性	31.9	2.5
Lupranate 268	低粘度ポリマー性	30.6	2.4
<b>MDI ブレポリマーの選択</b>			
Lupranate 5010	より高官能価のブレポリマー	28.6	2.3
Lupranate 223	純 MDI の低粘度誘導体	27.5	2.2
Lupranate 5040	中官能価、低粘度	26.3	2.1
Lupranate 5110	ポリマー性 MDI ブレポリマー	25.4	2.3
Lupranate MP102	4,4' MDI ブレポリマー	23	2
Lupranate 5090	特殊な 4,4' MDI ブレポリマー	23	2.1
Lupranate 5050	中官能価、中 NCO ブレポリマー	21.5	2.1
Lupranate 5030	特殊な MDI ブレポリマー	18.9	NA
Lupranate 5080	2,4' -MDI 向上ブレポリマー	15.9	2
Lupranate 5060	低官能価、高 MW ブレポリマー	15.5	2
Lupranate 279	2,4' -MDI 向上ブレポリマー	14	2
Lupranate 5070	特殊な MDI ブレポリマー	13	2
Lupranate 5020	低官能価、低 NCO	9.5	2
<b>トルエンジイソシアネート (TDI)</b>			
Lupranate T80-	80/20:2,4/2,6 TDI	48.3	2
Lupranate T80-	高酸性度 TDI	48.3	2
Lupranate 8020	80/20:TDI/ポリマー性 MDI	44.6	2.1

表 1

## 【0356】

本発明のある一定の実施形態に好適な他のイソシアネートは、バイエルマテリアルサイ

10

20

30

40

50

エンスから入手可能な商標 Desmodur (登録商標) で販売されている。ある一定の実施形態において、イソシアネートは、表 2 に示されている材料からなる群から選択される：

【表 2 - 1】

商標	説明
Desmodur (登録商標) 2460 M	高2, 4'-異性体含量のモノマー性ジフェニルメタンジイソシアネート
Desmodur (登録商標) 44 M	モノマー性ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MDI)
Desmodur (登録商標) 44 MC	Desmodur 44 MC Flakes は、モノマー性ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MDI) である
Desmodur (登録商標) BL 1100/	TDI ベースのブロック芳香族ポリイソシアネート
Desmodur (登録商標) BL 1265 MPA/X	TDI ベースのブロック芳香族ポリイソシアネート
Desmodur (登録商標) BL 3175 SN	TDI ベースのブロック脂肪族ポリイソシアネート
Desmodur (登録商標) BL 3272 MPA	TDI ベースのブロック脂肪族ポリイソシアネート
Desmodur (登録商標) BL 3370 MPA	TDI ベースのブロック脂肪族ポリイソシアネート
Desmodur (登録商標) BL 3475 BA/SN	TDI/IPDI ベースの脂肪族架橋焼付ウレタン樹脂
Desmodur (登録商標) BL 3575/I MPA/SN	TDI ベースのブロック脂肪族ポリイソシアネート
Desmodur (登録商標) BL 4265 SN	IPDI ベースのブロック脂肪族ポリイソシアネート
Desmodur (登録商標) BL 5375	H12MDI ベースのブロック脂肪族ポリイソシアネート
Desmodur (登録商標) CD-L	Desmodur CD-L は、ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネートベースの変性イソシアネートである

10

20

30

40

【表 2 - 2】

Desmodur (登録商標) CD-S	Desmodur CD-Sは、ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネートベースの変性イソシアネートである	
Desmodur (登録商標) D XP 2725	親水性変性ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) DA-L	ヘキサメチレンジイソシアネートベースの親水性脂肪族ポリイソシアネート	10
Desmodur (登録商標) DN	低揮発性の脂肪族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) E 1160	トルエンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 1361 BA	トルイレンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 1361 MPA/X	トルエンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	20
Desmodur (登録商標) E 14	トルエンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 15	トルエンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 1660	トルエンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 1750 PR	トルエンジイソシアネートベースのポリイソシアネートプレポリマー	30
Desmodur (登録商標) E 20100	ジフェニルメタンジイソシアネートベースの変性ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 21	ジフェニルメタンジイソシアネート (MDI) ベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 2190 X	ジフェニルメタンジイソシアネート (MDI) ベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	40
Desmodur (登録商標) E 22	ジフェニルメタンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 2200/76	Desmodur E 2200/76は、異性体を有する (MDI) ベースのプレポリマーである	

【表 2 - 3】

Desmodur (登録商標) E 23	ジフェニルメタンジイソシアネート (MDI) ベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 29	ジフェニルメタンジイソシアネートベースのポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 305	Desmodur E 305は、ヘキサメチレンジイソシアネートベースの高度に線状の脂肪族NCOプレポリマーである	10
Desmodur (登録商標) E 3265 MPA/SN	ヘキサメチレンジイソシアネート (HDI) ベースの脂肪族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E 3370	ヘキサメチレンジイソシアネートベースの脂肪族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E XP 2605	トルエンジイソシアネート及びジフェニルメタンジイソシアネートベースのポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E XP 2605	トルエンジイソシアネート及びジフェニルメタンジイソシアネートベースのポリイソシアネートプレポリマー	20
Desmodur (登録商標) E XP 2715	2, 4'-ジフェニルメタンジイソシアネート (2, 4'-MDI) 及びヘキサジオールアジペートベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E XP 2723	ジフェニルメタンジイソシアネート (MDI) ベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	30
Desmodur (登録商標) E XP 2726	2, 4'-ジフェニルメタンジイソシアネート (2, 4'-MDI) ベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E XP 2727	ジフェニルメタンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) E XP 2762	ジフェニルメタンジイソシアネート (MDI) ベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	40
Desmodur (登録商標) H	モノマー性脂肪族ジイソシアネート	
Desmodur (登録商標) HL	トルイレンジイソシアネート/ヘキサメチレンジイソシアネートベースの芳香族/脂肪族ポリイソシアネート	

【表 2 - 4】

Desmodur (登録商標) I	モノマー性脂環式ジイソシアネート	
Desmodur (登録商標) IL 1351	トルエンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) IL 1451	トルエンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネート	10
Desmodur (登録商標) IL BA	トルエンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) IL EA	トルイレンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネート樹脂	
Desmodur (登録商標) L 1470	トルエンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) L 67 BA	トルレンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネート	20
Desmodur (登録商標) L 67 MPA / X	トルレンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) L 75	トルレンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) LD	ヘキサメチレンジイソシアネート (HDI) ベースの低官能性イソシアネート	30
Desmodur (登録商標) LS 2424	高2, 4'-異性体含量のモノマー性ジフェニルメタンジイソシアネート	
Desmodur (登録商標) MT	ジフェニルメタンジイソシアネートベースのポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) N 100	脂肪族ポリイソシアネート (HDI ビウレット)	
Desmodur (登録商標) N 3200	脂肪族ポリイソシアネート (低粘度HDI ビウレット)	40
Desmodur (登録商標) N 3300	脂肪族ポリイソシアネート (HDI トリマー)	
Desmodur (登録商標) N 3368 B A / SN	脂肪族ポリイソシアネート (HDI トリマー)	

【表 2 - 5】

Desmodur (登録商標) N 3368 SN	脂肪族ポリイソシアネート (HDI トリマー)	
Desmodur (登録商標) N 3386 BA/SN	脂肪族ポリイソシアネート (HDI トリマー)	
Desmodur (登録商標) N 3390 BA	脂肪族ポリイソシアネート (HDI トリマー)	10
Desmodur (登録商標) N 3390 BA/SN	脂肪族ポリイソシアネート (HDI トリマー)	
Desmodur (登録商標) N 3400	脂肪族ポリイソシアネート (HDI ウレトジオン)	
Desmodur (登録商標) N 3600	脂肪族ポリイソシアネート (低粘度HDI トリマー)	
Desmodur (登録商標) N 3790 BA	脂肪族ポリイソシアネート (高官能性HDI トリマー)	20
Desmodur (登録商標) N 3800 脂肪族ポリイソシアネート (可撓化HDI トリマー)	脂肪族ポリイソシアネート (可撓化HDI トリマー)	
Desmodur (登録商標) N 3900	ヘキサメチレンジイソシアネートベースの低粘度脂肪族ポリイソシアネート樹脂	30
Desmodur (登録商標) N 50 BA/MPA	脂肪族ポリイソシアネート (HDI ビウレット)	
Desmodur (登録商標) N 75 BA	脂肪族ポリイソシアネート (HDI ビウレット)	
Desmodur (登録商標) N 75 MPA	脂肪族ポリイソシアネート (HDI ビウレット)	40
Desmodur (登録商標) N 75 MPA/X	脂肪族ポリイソシアネート (HDI ビウレット)	
Desmodur (登録商標) NZ 1	脂肪族ポリイソシアネート	

【表 2 - 6】

Desmodur (登録商標) PC-N	Desmodur PC-Nは、変性ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MDI) である	
Desmodur (登録商標) PF	Desmodur PFは、変性ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MDI) である	
Desmodur (登録商標) PL 340、60% BA/SN	IPDIベースのブロック脂肪族ポリイソシアネート	10
Desmodur (登録商標) PL 350	HDIベースのブロック脂肪族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) RC	トルエンジイソシアネート (TDI) のポリイソシアヌレート酢酸エチル溶液	
Desmodur (登録商標) RE	トリフェニルメタン-4, 4', 4"-トリイソシアネートの酢酸エチル溶液	
Desmodur (登録商標) RFE	トリス (p-イソシアナトフェニル) チオホスフェートの酢酸エチル溶液	20
Desmodur (登録商標) RN	脂肪族及び芳香族NCO基を有するポリイソシアヌレート酢酸エチル溶液	
Desmodur (登録商標) T 100	純2, 4'-トルエンジイソシアネート (TDI)	
Desmodur (登録商標) T 65 N	比67:33の2, 4-及び2, 6-トルエンジイソシアネート (TDI)	
Desmodur (登録商標) T 80	比80:20の2, 4-及び2, 6-トルエンジイソシアネート (TDI)	30
Desmodur (登録商標) T 80 P	高含量の加水分解性塩素を含む比80:20の2, 4-及び2, 6-トルエンジイソシアネート (TDI)	
Desmodur (登録商標) VH 20 N	ジフェニルメタンジイソシアネートベースのポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) VK	ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MDI) と異性体及びより高官能性の同族体 (PMDI) とのDesmodur VK製品再混合物	40
Desmodur (登録商標) VKP 79	Desmodur VKP 79は、異性体及び同族体を含む変性ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MDI) である	

【表 2 - 7】

Desmodur (登録商標) VKS 10	Desmodur VKS 10は、ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MDI) と異性体及びより高官能性の同族体 (PMDI) との混合物である	
Desmodur (登録商標) VKS 20	Desmodur VKS 20は、ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MDI) と異性体及びより高官能性の同族体 (PMDI) との混合物である	
Desmodur (登録商標) VKS 20 F	Desmodur VKS 20 Fは、ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MDI) と異性体及びより高官能性の同族体 (PMDI) との混合物である	10
Desmodur (登録商標) VKS 70	Desmodur VKS 70は、ジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MDI) と異性体及び同族体との混合物である	
Desmodur (登録商標) VL	ジフェニルメタンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) VP LS 20 78/2	IPDIベースのブロック脂肪族ポリイソシアネート	20
Desmodur (登録商標) VP LS 20 86	ジフェニルメタンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) VP LS 22 57	HDIベースのブロック脂肪族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) VP LS 23 71	イソホロンジイソシアネートベースの脂肪族ポリイソシアネートプレポリマー	30
Desmodur (登録商標) VP LS 23 97	Desmodur VP LS 23 97は、ポリプロピレンエーテルグリコール及びジフェニルメタンジイソシアネート (MDI) ベースの線状プレポリマーである。含有	
Desmodur (登録商標) W	モノマー性脂環式ジイソシアネート	40
Desmodur (登録商標) W/1	モノマー性脂環式ジイソシアネート	
Desmodur (登録商標) XP 2404	Desmodur XP 2404は、モノマー性ポリイソシアネートの混合物である	

【表 2 - 8】

Desmodur (登録商標) XP 2406	イソホロンジイソシアネートベースの脂肪族ポリイソシアネートプレポリマー	
Desmodur (登録商標) XP 2489	脂肪族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) XP 2505	Desmodur XP 2505は、異性体及びより高官能性の同族体 (PMD1) を含むジフェニルメタン-4, 4'-ジイソシアネート (MD1) ベースのエーテル基含有プレポリマーである	10
Desmodur (登録商標) XP 2551	ジフェニルメタンジイソシアネートベースの芳香族ポリイソシアネート	
Desmodur (登録商標) XP 2565	イソホロンジイソシアネートベースの低粘度脂肪族ポリイソシアネート樹脂	
Desmodur (登録商標) XP 2580	ヘキサメチレンジイソシアネートベースの脂肪族ポリイソシアネート	20
Desmodur (登録商標) XP 2599	ヘキサメチレン-1, 6-ジイソシアネート (HD1) ベースのエーテル基含有脂肪族プレポリマー	
Desmodur (登録商標) XP 2617	Desmodur XP 2617は、ヘキサメチレンジイソシアネートベースの高級線状NCOプレポリマーである	
Desmodur (登録商標) XP 2665	ジフェニルメタンジイソシアネート (MD1) ベースの芳香族ポリイソシアネートプレポリマー	30
Desmodur (登録商標) XP 2675	脂肪族ポリイソシアネート (より高官能性のHD1トリマー)	
Desmodur (登録商標) XP 2679	脂肪族ポリイソシアネート (HD1アロファネートトリマー)	
Desmodur (登録商標) XP 2714	ヘキサメチレンジイソシアネートベースのシラン官能性脂肪族ポリイソシアネート	40
Desmodur (登録商標) XP 2730	低粘度脂肪族ポリイソシアネート (HD1ウレトジオン)	

【表 2 - 9】

Desmodur (登録商標) XP 2731	脂肪族ポリイソシアネート (HDIアロファネートトリマー)
Desmodur (登録商標) XP 2742	SiO <sub>2</sub> -ナノ粒子を含有する変性脂肪族ポリイソシアネート (HDI-トリマー)

表 2

10

## 【0357】

本発明のある一定の実施形態に好適なさらなるイソシアネートは、商標 Tolonate (登録商標) (Perstorp) で販売されている。ある一定の実施形態において、イソシアネートは、表 3 に示されている材料からなる群から選択される：

【表 3】

Tolonate (商標) D2	芳香族溶媒中75%固体で供給されたブロック脂肪族ポリイソシアネート	
Tolonate (商標) HDB	粘性溶媒不含脂肪族ポリイソシアネート	
Tolonate (商標) HDB-LV	溶媒不含低粘度脂肪族ポリイソシアネート	10
Tolonate (商標) HDB 75 B	酢酸メトキシプロピル中75%固体で供給された脂肪族ポリイソシアネート	
Tolonate (商標) HDB 75 BX	75%固体で供給された脂肪族ポリイソシアネート	
Tolonate (商標) HDT	中粘度溶媒不含脂肪族ポリイソシアネート	
Tolonate (商標) HDT-LV	溶媒不含低粘度脂肪族ポリイソシアネート	20
Tolonate (商標) HDT-LV2	溶媒不含超低粘度脂肪族ポリイソシアネート	
Tolonate (商標) HDT 90	90%固体で供給された、HDI-トリマー (イソシアヌレート) ベースの脂肪族ポリイソシアネート	
Tolonate (商標) HDT 90 B	90%固体で供給された、HDI-トリマー (イソシアヌレート) ベースの脂肪族ポリイソシアネート	30
Tolonate (商標) IDT 70 B	70%固体で供給された、HDI-トリマー (イソシアヌレート) ベースの脂肪族ポリイソシアネート	
Tolonate (商標) IDT 70 S	70%固体で供給された、HDI-トリマー (イソシアヌレート) ベースの脂肪族ポリイソシアネート	
Tolonate (商標) X FD 90 B	90%固体で供給された、HDI-トリマーベースの高官能性高速乾燥脂肪族ポリイソシアネート	

表 3

40

## 【0358】

本発明のある一定の実施形態に好適な他のイソシアネートは、バイエルマテリアルサイエンスから入手可能な商標 Mondur (登録商標) で販売されている。ある一定の実施形態において、イソシアネートは、表 4 に示されている材料からなる群から選択される：

【表 4 a - 1】

商標		説明	
MONDUR 45	4	TDI/MDIブレンドポリイソシアネート;トルエンジイソシアネート及びポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネートのブレンド;NCO重量:44.5~45.2%	
MONDUR 48	4	変性ポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート(pMDI)ブレポリマー;NCO重量:27.7%;25℃での粘度:140mPa・s;等価重量:152;官能価:2.2	
MONDUR 89	4	変性ポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート(pMDI);NCO重量:31.5%;25℃での粘度:700mPa・s;等価重量:133;官能価:3.0	10
MONDUR 01	5	変性モノマー性ジフェニルメタンジイソシアネート(mMDI);イソシアネート末端ポリエステルプレポリマー;NCO重量:19.0%;25℃での粘度:1,100mPa・s;等価重量:221;官能価:2	
MONDUR 41	5	ポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート(pMDI);複合木製品のためのかつ接着剤処方物における原料としての結着剤;NCO重量:31.5%;25℃での粘度:200mPa・s	
MONDUR 82	5	ポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート(pMDI);複合木製品のためのかつ接着剤処方物における原料としての結着剤;NCO重量:31.0%;25℃での粘度:200mPa・s	20
MONDUR 41-Light	5	ポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート(pMDI);NCO重量:32.0%;25℃での粘度:70mPa・s;等価重量:131;官能価:2.5	
MONDUR 41	8	変性ポリマー性MDIブレポリマー;NCO、Wt30.5%;酸性度、Wt0.02%;アミン等価重量:132;25℃での粘度:350mPa・s;25℃での比重:1.24;引火点PMCC、°F>200	
MONDUR 437	1	変性ジフェニルメタンジイソシアネート(mMDI);イソシアネート末端ポリエーテルプレポリマー;NCO重量:10.0%;25℃での粘度:2,500mPa・s;等価重量:420;官能価:2	30
MONDUR 453	1	変性ジフェニルメタンジイソシアネート(mMDI);ポリプロピレンエーテルグリコール(PPG)ベースのイソシアネート末端ポリエーテルプレポリマー;NCO重量:16.5%;25℃での粘度:600mPa・s;等価重量:254;官能価:2	
MONDUR 515	1	変性ポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート(pMDI)ブレポリマー;硬質ポリウレタンフォームの製造において、特に、家電業界に用いられる;NCO重量:30.5%;25℃での粘度:350mPa・s	
MONDUR 522	1	変性モノマー性4,4-ジフェニルメタンジイソシアネート(mMDI);NCO重量:29.5%;25℃での粘度:50mPa・s;等価重量:143;官能価:2.2	40

【表 4 a - 2】

MONDUR A-2300	M	変性モノマー性MDI、アロファネートー変性4,4'-ジフェニルメタンジイソシアネート (mMDI); NCO重量: 23.0%; 25°Cでの粘度: 450 mPa·s; 等価重量: 183; 官能価: 2.0	
MONDUR A 2600	M	変性モノマー性MDI、アロファネートー変性4,4'-ジフェニルメタンジイソシアネート (mMDI); NCO重量: 26.0%; 25°Cでの粘度: 100 mPa·s; 等価重量: 162; 官能価: 2.0	
MONDUR A 2601	M	芳香族ジイソシアネートブレンド、2,4'-異性体含有ポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート (pMDI) とブレンドされたアロファネートー変性4,4'-ジフェニルメタンジイソシアネート (MDI); NCO重量: 29.0%; 25°Cでの粘度: 60 mPa·s; 等価重量: 145; 官能価: 2.2	10
MONDUR A 2603	M	MDIプレポリマー; アロファネートー変性4,4'-ジフェニルメタンジイソシアネート (MDI) とブレンドされたイソシアネート末端 (MDI) プレポリマー; NCO重量: 16.0%; 25°Cでの粘度: 1,050 mPa·s; 等価重量: 263; 官能価: 2.0	
MONDUR A-2902	M	変性モノマー性MDI、アロファネートー変性4,4'-ジフェニルメタンジイソシアネート (mMDI); NCO重量: 29.0%; 25°Cでの粘度: 40 mPa·s; 等価重量: 145; 官能価: 2.0	20
MONDUR A-2903	M	変性モノマー性MDI; イソシアネート末端 (MDI) プレポリマー; NCO重量: 19.0%; 25°Cでの粘度: 400 mPa·s; 等価重量: 221; 官能価: 2.0	
MONDUR A-2904	M	アロファネートー変性MDI ポリエーテルプレポリマー; NCO重量: 12.0%; 25°Cでの粘度: 1,800 mPa·s; 等価重量: 350; 官能価: 2.0	
MONDUR B	M	高純度グレード二官能性ジイソシアネート、ジフェニルメタン4,4'-ジイソシアネート; ポリウレタンエラストマー、接着剤、コーティング及び中間ポリウレタン製品において用いられる; 外観: 無色固体または液体; 50°C±15.5での比重: 1.19; 引火点: 202°C PMCC; 粘度 (溶融形態において) 4.1 mPa·S; 容積密度: 1.01 b/gal (融解) または 9.931 b/gal (溶融); 凍結温度: 39°C	30
MONDUR LQ	M	モノマー性ジフェニルメタンジイソシアネート; フォーム、キャストエラストマー、コーティング及び接着剤に用いられる; 外観: 淡黄色透明液体、NCO 33.4重量%; 25°Cでの比重: 1.19、引火点: 196°C、DIN 51758; 凍結温度: 11~15°C	
MONDUR Q	M	高純度グレード二官能性イソシアネート、ジフェニルメタン4,4'-ジイソシアネート (MDI); 固体ポリウレタンエラストマー、接着剤、コーティングの生成において、及び中間ポリウレタン製品において用いられる; 外観: 無色固体または液体; 50°Cでの比重: 1.19; 引火点: 202°C PMCC; 25°Cでの粘度: 4.1 mPa·S; 容積密度: 1.01 b/gal (融解) または 9.931 b./gal (溶融); 凍結温度 39°C	40

【表 4 a - 3】

MONDUR M R	ポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート (pMDI); NCO重量: 31.5%; 25°Cでの粘度: 200 mPa・s; 等価重量: 133; 官能価: 2.8	
MONDUR M R LIGHT	ポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート (pMDI); NCO重量: 31.5%; 25°Cでの粘度: 200 mPa・s; 等価重量: 133; 官能価: 2.8	
MONDUR M R-5	ポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート (pMDI); NCO重量: 32.5%; 25°Cでの粘度: 50 mPa・s; 等価重量: 129; 官能価: 2.4	10
MONDUR M RS	2, 4' リッチなポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート (pMDI); NCO重量: 31.5%; 25°Cでの粘度: 200 mPa・s; 等価重量: 133; 官能価: 2.6	
MONDUR M RS 2	2, 4' リッチなポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート (pMDI); NCO重量: 33.0%; 25°Cでの粘度: 25 mPa・s; 等価重量: 127; 官能価: 2.2	
MONDUR M RS-4	2, 4' リッチなポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート (pMDI); NCO重量: 32.5%; 25°Cでの粘度: 40 mPa・s; 等価重量: 129; 官能価: 2.4	20
MONDUR M RS-5	2, 4' リッチなポリマー性ジフェニルメタンジイソシアネート (pMDI); NCO重量: 32.3%; 25°Cでの粘度: 55 mPa・s; 等価重量: 130; 官能価: 2.4	
MONDUR P C	変性4, 4' ジフェニルメタンジイソシアネート (mMDI); NCO重量: 25.8%; 25°Cでの粘度: 145 mPa・s; 等価重量: 163; 官能価: 2.1	
MONDUR P F	変性4, 4' ジフェニルメタンジイソシアネート (mMDI) プレポリマー; NCO重量: 22.9%; 25°Cでの粘度: 650 mPa・s; 等価重量: 183; 官能価: 2	
MONDUR T D-65	モノマー性トルエンジイソシアネート (TDI); 2, 4及び2, 6 TDIの65/35混合物; NCO重量: 48%; 25°Cでの粘度: 3 mPa・s; 等価重量: 87.5; 官能価: 2	30
MONDUR T D-80 GRA DE A	モノマー性トルエンジイソシアネート (TDI); 2, 4及び2, 6 異性体の80/20混合物; NCO重量: 48%; 25°Cでの粘度: 5 mPa・s; 等価重量: 87.5; 官能価: 2	
MONDUR T D-80 GRA DE A/GRA DE B	モノマー性トルエンジイソシアネート (TDI); 2, 4及び2, 6 異性体の80/20混合物; NCO重量: 48%; 25°Cでの粘度: 5 mPa・s; 等価重量: 87.5; 官能価: 2	

表 4

別表 C : 添加剤

【0359】

上記のように、いくつかの実施形態において、本発明の方法及び組成物は、脂肪族ポリカーボネートポリオールの一つ以上を含むいわゆる B 側混合物を含む。フォームを生成するために、B 側混合物を、1つ以上のポリイソシアネート（またはポリイソシアネート前駆体）を含有する A 側混合物と反応させる。典型的には、A 側及び B 側混合物の一方または両方が、様々な種類のさらなる成分及び添加剤を含有する。ある一定の実施形態において、本発明のフォームのいずれかが生成される B 側混合物は、1つ以上のさらなるポリオール及び/または1つ以上の添加剤を含有する。ある一定の実施形態において、添加剤は、溶媒、水、触媒、界面活性剤、発泡剤、着色剤、UV安定剤、難燃剤、抗菌剤、可塑性

40

50

、セルオープナー、帯電防止組成物、相溶化剤などからなる群から選択される。ある一定の実施形態において、B側混合物は、イソシアネートとの結合形成反応に参与するさらなる反応性小分子、例えば、アミン、水、アルコール、チオールまたはカルボン酸を含む。

### 【0360】

#### A.さらなるポリオール

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、上記の脂肪族ポリカーボネートポリオールを、例えばポリウレタンフォーム組成物において常套的に用いられる1つ以上のさらなるポリオールと組み合わせて含む。さらなるポリオールが存在する実施形態において、かかるポリオールは、全ポリオール含量の最大で約95重量%を構成してよく、ポリオール混合物の残りは、上記セクションIならびに本明細書における実施例及び具体的

10

### 【0361】

本発明のB側混合物が1つ以上の脂肪族ポリカーボネートポリオール及び1つ以上のさらなるポリオールの混合物を含むまたはこれから誘導される実施形態において、さらなるポリオールは、ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、ポリスチレンポリオール、ポリエーテル-カーボネートポリオール、ポリエーテル-エステルカーボネート、及びこれらのうちいずれか2つ以上の混合物からなる群から選択される。ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、本明細書において上記の1つ以上の脂肪族ポリカーボネートポリオールと、商標：Voranol（登録商標）（ダウ）、SpecFlex（登録商標）（ダウ）、Tercarol（登録商標）（ダウ）、Caradol（登録商標）（シェル）、Hyperliter（登録商標）、Acclaim（登録商標）（バイエルマテリアルサイエンス）、Ultracel（登録商標）（バイエルマテリアルサイエンス）、Desmophen（登録商標）（バイエルマテリアルサイエンス）、and Arcol（登録商標）（バイエルマテリアルサイエンス）で市販されている材料からなる群から選択される1つ以上の他のポリオールとの混合物を含むまたはこれから誘導される。

20

### 【0362】

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、ポリエーテルポリオールを本明細書に記載の1つ以上の脂肪族ポリカーボネートポリオールと組み合わせて含有する混合物を含む。ある一定の実施形態において、かかるポリエーテルポリオールは、約500～約10,000g/molのMnを有することを特徴とする。ある一定の実施形態において、かかるポリエーテルポリオールは、約500～約5,000g/molのMnを有する。ある一定の実施形態において、ポリエーテルポリオールは、ポリエチレングリコールを含む。ある一定の実施形態において、ポリエーテルポリオールは、ポリプロピレングリコールを含む。

30

### 【0363】

存在してよいポリエーテルポリオールとして、公知の方法によって得られ得るものが挙げられ、例えば、ポリエーテルポリオールは、触媒として水酸化アルカリ、例えば、水酸化ナトリウムもしくは水酸化カリウム、またはアルカリアルコラート、例えば、ナトリウムメチラート、ナトリウムエチラート、カリウムエチラートもしくはカリウムイソプロピラートをを用いた、2～8、好ましくは3～8個の反応性水素を含有する少なくとも1つの開始剤分子の添加によるアニオン重合によって、あるいは触媒として、ルイス酸、例えば、五塩化アンチモン、三フッ化ホウ素エーテラートなど、または漂白土を用いた、アルキレンラジカル中に2～4個の炭素を含む1つ以上のアルキレンオキシドからのカチオン重合によって生成され得る。任意の好適なアルキレンオキシド、例えば、1,3-プロピレンオキシド、1,2-及び2,3-ブチレンオキシド、アミレンオキシド、スチレンオキシド、好ましくはエチレンオキシド及びプロピレンオキシドならびにこれらのオキシドの混合物が用いられてよい。ポリアルキレンポリエーテルポリオールは、他の出発物質、例えば、テトラヒドロフラン及びアルキレンオキシド-テトラヒドロフラン混合物；エ

40

50

ピハロヒドリン、例えば、エピクロロヒドリン；ならびにアラルキレンオキシド、例えば、スチレンオキシドから調製されてよい。ポリアルキレンポリエーテルポリオールは、開始剤上へのプロピレンオキシドの添加からの、第1級または第2級いずれかの水酸基、好ましくは、第2級水酸基を有してよい、なぜなら、これらの基は、より遅く反応するからである。ポリエーテルポリオールの中でも、ポリオキシエチレングリコール、ポリオキシプロピレングリコール、ポリオキシブチレングリコール、ポリテトラメチレングリコール、ブロックコポリマー、例えば、ポリオキシプロピレン及びポリオキシエチレングリコールの組み合わせ、ポリ-1,2-オキシブチレン及びポリオキシエチレングリコールの組み合わせ、ポリ-1,4-テトラメチレン及びポリオキシエチレングリコールの組み合わせ、ならびに2つ以上のアルキレンオキシドのブレンドまたは逐次添加から調製されるコポリマーグリコールが挙げられる。ポリアルキレンポリエーテルポリオールは、任意の公知のプロセス、例えば、Encyclopedia of Chemical Technology, Vol.7, pp.257-262, published by Interscience Publishers, Inc. (1951)においてまたは米国特許第1,922,459号においてWurtzによって開示されているプロセスによって調製されてよい。ポリエーテルとして、多価アルコール、例えば、エチレングリコール、プロピレングリコール、ジプロピレングリコール、トリメチレングリコール、1,2-ブタンジオール、1,5-ペンタンジオール、1,6-ヘキサジオール、1,7-ヘプタンジオール、ヒドロキノ、レゾルシノールグリセロール、グリセリン、1,1,1-トリメチロール-プロパン、1,1,1-トリメチロールエタン、ペンタエリスリトール、1,2,6-ヘキサントリオール、 $\alpha$ -メチルグルコシド、スクロース、及びソルビトールのアルキレンオキシド付加生成物が挙げられる。フェノール、例えば、ビスフェノールAとして一般的に公知の2,2-ビス(4-ヒドロキシフェニル)-プロパンから誘導される化合物も用語「多価アルコール」内に含まれる。ポリオール組成物において、少なくとも2つの第1級もしくは第2級アミン基を有する化合物、4つ以上の水酸基を有する多価アルコール、例えばスクロース、または少なくとも4つの水酸基を有する多価アルコールを使用する開始剤及び少なくとも2つの第1級もしくは第2級アミン基を有する化合物の混合物によって開始される少なくとも1つのポリオールが特に好ましい。アルキレンオキシドと縮合されていてよい好適な有機アミン開始剤として、芳香族アミン、例えば、アニリン、N-アルキルフェニレン-ジアミン、2,4'-、2,2'-、及び4,4'-メチレンジアニリン、2,6-または2,4-トルエンジアミン、隣接トルエンジアミン、*o*-クロロアニリン、*p*-アミノアニリン、1,5-ジアミノナフタレン、メチレンジアニリン、アニリン及びホルムアルデヒドの種々の縮合生成物、ならびに異性体ジアミノトルエン；ならびに脂肪族アミン、例えば、モノ-、ジ-、及びトリアルカノールアミン、エチレンジアミン、プロピレンジアミン、ジエチレントリアミン、メチルアミン、トリイソプロパノールアミン、1,3-ジアミノプロパン、1,3-ジアミノブタン、及び1,4-ジアミノブタンが挙げられる。好ましいアミンとして、モノエタノールアミン、隣接トルエンジアミン、エチレンジアミン、及びプロピレンジアミンが挙げられる。本発明における使用に企図されるさらに別のクラスの芳香族ポリエーテルポリオールは、例えば、米国特許第4,883,826号；同第4,939,182号；及び同第5,120,815号に開示されている、「マンニヒ」ポリオールと頻繁に呼ばれるマンニヒ系ポリオール、フェノール/ホルムアルデヒド/アルカノールアミン樹脂のアルキレンオキシド付加物である。

#### 【0364】

さらなるポリオールが存在するある一定の実施形態において、該ポリオールは、全ポリオール含量の約5重量%~約95重量%を構成してよく、ポリオール混合物の残りは、上記セクションIならびに本明細書における実施例及び具体的な実施形態に記載されている1つ以上の脂肪族ポリカーボネートポリオールから構成されている。ある一定の実施形態において、B側混合物の全ポリオール含量の最大で約75重量%が、脂肪族ポリカーボネートポリオールである。ある一定の実施形態において、B側混合物の全ポリオール含量の最大で約50重量%が、脂肪族ポリカーボネートポリオールである。ある一定の実施形態

10

20

30

40

50

において、B側混合物の全ポリオール含量の最大で約40重量%、最大で約30重量%、最大で約25重量%、最大で約20重量%、最大で約15重量%、または最大で約10重量%が、脂肪族ポリカーボネートポリオールである。ある一定の実施形態において、B側混合物の全ポリオール含量の少なくとも約5重量%が、脂肪族ポリカーボネートポリオールである。ある一定の実施形態において、B側混合物の全ポリオール含量の少なくとも約10重量%が、脂肪族ポリカーボネートポリオールである。ある一定の実施形態において、B側混合物の全ポリオール含量の少なくとも約15重量%、少なくとも約20重量%、少なくとも約25重量%、少なくとも約40重量%、または少なくとも約50重量%が、脂肪族ポリカーボネートポリオールである。

#### 【0365】

##### B. 触媒

ある一定の実施形態において、B側混合物は、ポリオール（及び存在する場合、水）とポリイソシアネートとの反応のための1つ以上の触媒を含有する。第3級アミン化合物及び有機金属化合物を含めた任意の好適なウレタン触媒が用いられてよい。例示的な第3級アミン化合物として、トリエチレンジアミン、N-メチルモルホリン、N,N-ジメチルシクロヘキシルアミン、ペンタメチルジエチレントリアミン、テトラメチルエチレンジアミン、1-メチル-4-ジメチルアミノエチルピペラジン、3-メトキシ-N-ジメチルプロピルアミン、N-エチルモルホリン、ジエチルエタノールアミン、N-ココモルホリン、N,N-ジメチル-N',N'-ジメチルイソプロピルプロピレンジアミン、N,N-ジエチル-3-ジエチルアミノプロピルアミンジメチルベンジルアミン、1,8-ジアザビシクロウンデカ-7-エン(DBU)、1,4-ジアザビシクロ[2.2.2]オクタン(DABCO)トリアザビシクロデセン(TBD)、及びN-メチルトリアザビシクロデセンが挙げられる。(MTBD)例示的な有機金属触媒として、有機水銀、有機鉛、有機鉄及び有機スズ触媒が挙げられ、これらの中でも有機スズ触媒が好ましい。好適なスズ触媒として、塩化第一スズ、カルボン酸のスズ塩、例えば、ジラウリン酸ジブチルスズ、ならびに他の有機金属化合物（例えば、米国特許第2,846,408号などに開示されている）が挙げられる。ポリイソシアネートの三量体化によりポリイソシアヌレートを生ずるための触媒、例えば、アルカリ金属アルコキシドが、本明細書において場合により使用されてもよい。かかる触媒は、ポリウレタンまたはポリイソシアヌレート形成速度を測定可能に増加させる量で用いられる。

#### 【0366】

本発明のB側混合物が触媒を含むある一定の実施形態において、触媒は、スズ系材料を含む。ある一定の実施形態において、B側混合物に含まれているスズ触媒は、ジラウリン酸ジブチルスズ、ビス(ラウリルチオ)スズ酸ジブチル、ビス(イソオクチルメルカプト酢酸)ジブチルスズ及びビス(イソオクチルマレイン酸)ジブチルスズ、オクタン酸スズ及びこれらのうちいずれか2つ以上の混合物からなる群から選択される。

#### 【0367】

ある一定の実施形態において、B側混合物に含まれている触媒は、第3級アミンを含む。ある一定の実施形態において、B側混合物に含まれている触媒は、DABCO、ペンタメチル(metyl)ジプロピレントリアミン、ビス(ジメチルアミノエチルエーテル)、ペンタメチルジエチレントリアミン、DBUフェノール塩、ジメチルシクロヘキシルアミン、2,4,6-トリス(N,N-ジメチルアミノメチル)フェノール(DMT-30)、1,3,5-トリス(3-ジメチルアミノプロピル)ヘキサヒドロ-s-トリアジン、アンモニウム塩及びこれらの任意の化合物または処方物からなる群から選択される。

#### 【0368】

触媒の典型的な量は、B側混合物における全ポリオール100重量部当たり0.001~10部の触媒である。ある一定の実施形態において、処方物における触媒レベルは、用いられる場合、B側混合物に存在する量を基準にして約0.001pph(100当たりの重量部)~約3pphの範囲である。ある一定の実施形態において、触媒レベルは、約0.05pph~約1pph、または約0.1pph~約0.5pphの範囲である。

10

20

30

40

50

## 【 0 3 6 9 】

## C . 発泡剤

ある一定の実施形態において、本発明の B 側混合物は、発泡剤を含有する。発泡剤は、化学発泡剤であってよく（典型的には、A 側成分と反応して  $\text{CO}_2$  または他の揮発性化合物を遊離させる分子）、または、物理発泡剤であってよい（典型的には、フォーム形成の際に揮発する低沸点を有する化合物。多くの発泡剤が当該分野において公知であり、従来の方法論に従って本発明の B 側組成物に適用されてよい。発泡剤及び添加量の選択は、常套の実験事項であり得る。

## 【 0 3 7 0 】

ある一定の実施形態において、発泡剤は、化学発泡剤を含む。ある一定の実施形態において、水が発泡剤として存在する。水は、A 側混合物におけるイソシアネートの一部と反応することによって発泡剤として機能して、二酸化炭素ガスを生成する。同様に、ギ酸が発泡剤として含まれていてよい。ギ酸は、イソシアネートの一部と反応することによって発泡剤として機能して、二酸化炭素及び一酸化炭素ガスを生成する。

10

## 【 0 3 7 1 】

ある一定の実施形態において、水は、B 側組成物におけるポリオール 100 重量部当たり 0.5 ~ 20 部の量で存在する。ある一定の実施形態において、水は、B 側組成物におけるポリオール 100 重量部当たり約 1 ~ 10 部、約 2 ~ 8 部、または約 4 ~ 6 部で存在する。ある一定の実施形態において、2 部以下の水、1.5 部以下の水、または 0.75 部以下の水が有利である。ある一定の実施形態において、水が存在しないことが有利である。

20

## 【 0 3 7 2 】

ある一定の実施形態において、ギ酸は、B 側組成物におけるポリオール 100 重量部当たり 0.5 ~ 20 部の量で存在する。ある一定の実施形態において、ギ酸は、B 側組成物におけるポリオール 100 重量部当たり約 1 ~ 10 部、約 2 ~ 8 部、または約 4 ~ 6 部で存在する。

## 【 0 3 7 3 】

ある一定の実施形態において、物理発泡剤が用いられてよい。好適な物理発泡剤として、炭化水素、フッ素含有有機分子炭化水素、クロロ炭素、アセトン、ギ酸メチル及び二酸化炭素が挙げられる。いくつかの実施形態において、フッ素含有有機分子として、過フッ化化合物、クロロフルオロ炭素、ヒドロクロロフルオロ炭素、及びヒドロフルオロ炭素が挙げられる。好適なヒドロフルオロアルカンは、ジフルオロメタン (R - 32)、1, 1, 1, 2 - テトラフルオロエタン (R - 134a)、1, 1 - ジフルオロエタン (R - 152a)、ジフルオロクロロエタン (R - 142b)、トリフルオロメタン (R - 23)、ヘプタフルオロプロパン (R - 227a)、ヘキサフルオロプロパン (R 136)、1, 1, 1 - トリフルオロエタン (efhane) (R - 133)、フルオロエタン (R - 161)、1, 1, 1, 2, 2 - ペンタフルオロプロパン (R - 245fa)、ペンタフルオロプロピレン (R 2125a)、1, 1, 1, 3 - テトラフルオロプロパン、テトラフルオロ (fhioro) プロピレン (R - 2134a)、1, 1, 2, 3, 3 - ペンタフルオロプロパン及び 1, 1, 1, 3, 3 - ペンタフルオロ - n - ブタンを含めた  $\text{C}_{1-4}$  化合物である。

30

40

## 【 0 3 7 4 】

ある一定の実施形態において、ヒドロフルオロ炭素発泡剤は、B 側混合物に存在するとき、テトラフルオロエタン (R - 134a)、ペンタフルオロプロパン (R - 245fa) 及びペンタフルオロブタン (R - 365) からなる群から選択される。

## 【 0 3 7 5 】

発泡剤としての使用に好適な炭化水素として、非ハロゲン化炭化水素、例えば、ブタン、イソブタン、2, 3 - ジメチルブタン、n - 及び i - ペンタン異性体、ヘキサン異性体、ヘプタン異性体、ならびにシクロペンタン、シクロヘキサン及びシクロヘプタンを含めたシクロアルカンが挙げられる。発泡剤としての使用に好ましい炭化水素として、シクロ

50

ペンタン、とりわけ、n - ペンタン、イソペンタンが挙げられる。ある一定の実施形態において、B側組成物は、テトラフルオロエタン(R - 134a)、ペンタフルオロプロパン(R - 245fa)、ペンタフルオロブタン(R - 365)、シクロペンタン、n - ペンタン及びイソペンタンからなる群から選択される物理発泡剤を含む。

【0376】

物理発泡剤が存在するある一定の実施形態において、物理発泡剤は、B側組成物におけるポリオール100重量部当たり約1～約20部の量で用いられる。ある一定の実施形態において、物理発泡剤は、B側組成物におけるポリオール100重量部当たり2～15部、または4～10部で存在する。

【0377】

D. 反応性小分子

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、イソシアネートに対して反応性の1つ以上の小分子を含む。ある一定の実施形態において、本発明B側混合物に含まれる反応性小分子は、アルコール、アミン、カルボン酸、チオール、及びこれらのいずれか2つ以上の組み合わせからなる群から選択される、1つ以上の官能基を有する有機分子を含む。いくつかの実施形態において、非ポリマー性小分子は、1,000g/mol未満、または1,500g/mol未満の分子量を有する。

【0378】

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、1つ以上のアルコールを含む。ある一定の実施形態において、B側混合物は、多価アルコールを含む。

【0379】

ある一定の実施形態において、本発明B側混合物に含まれる反応性小分子は、二価アルコールを含む。ある一定の実施形態において、二価アルコールは、C<sub>2-40</sub>ジオールを含む。ある一定の実施形態において、二価アルコールは、1,2-エタンジオール、1,2-プロパンジオール、1,3-プロパンジオール、1,2-ブタンジオール、1,3-ブタンジオール、1,4-ブタンジオール、1,5-ペンタンジオール、2,2-ジメチルプロパン-1,3-ジオール、2-ブチル-2-エチルプロパン-1,3-ジオール、2-メチル-2,4-ペンタンジオール、2-エチル-1,3-ヘキサンジオール、2-メチル-1,3-プロパンジオール、1,5-ヘキサンジオール、1,6-ヘキサンジオール、1,8-オクタンジオール、1,10-デカンジオール、1,12-ドデカンジオール、2,2,4,4-テトラメチルシクロブタン-1,3-ジオール、1,3-シクロペンタンジオール、1,2-シクロヘキサンジオール、1,3-シクロヘキサンジオール、1,4-シクロヘキサンジオール、1,2-シクロヘキサジメタノール、1,3-シクロヘキサジメタノール、1,4-シクロヘキサジメタノール、1,4-シクロヘキサジエタノール、イソソルビド、グリセロールモノエステル、グリセロールモノエーテル、トリメチロールプロパンモノエステル、トリメチロールプロパンモノエーテル、ペンタエリスリトールジエステル、ペンタエリスリトールジエーテル、及びこれらの任意のアルコキシル化誘導体からなる群から選択される。

【0380】

ある一定の実施形態において、本発明B側混合物に含まれる反応性小分子は、ジエチレングリコール、トリエチレングリコール、テトラエチレングリコール、高級ポリ(エチレングリコール)、例えば、220～約2000g/molの数平均分子量を有するもの、ジプロピレングリコール、トリプロピレングリコール、ならびに高級ポリ(プロピレングリコール)、例えば、234～約2000g/molの数平均分子量を有するものからなる群から選択される二価アルコールを含む。

【0381】

ある一定の実施形態において、本発明B側混合物に含まれる反応性小分子は、二酸、ジオール、またはヒドロキシ酸からなる群から選択される化合物のアルコキシル化誘導体を含む。ある一定の実施形態において、アルコキシル化誘導体は、エトキシル化またはプロポキシル化化合物を含む。

10

20

30

40

50

## 【0382】

ある一定の実施形態において、本発明B側混合物に含まれる反応性小分子は、ポリマー性ジオールを含む。ある一定の実施形態において、ポリマー性ジオールは、ポリエーテル、ポリエステル、ヒドロキシ末端ポリオレフィン、ポリエーテル-コポリエステル、ポリエーテルポリカーボネート、ポリカーボネート-コポリエステル、及びこれらのいずれかのアルコキシル化類縁体からなる群から選択される。ある一定の実施形態において、ポリマー性ジオールは、約2000g/mol未満の平均分子量を有する。

## 【0383】

いくつかの実施形態において、本発明B側混合物に含まれる反応性小分子は、トリオールまたはそれより多価のアルコールを含む。ある一定の実施形態において、反応性小分子は、グリセロール、1,2,4-ブタントリオール、2-(ヒドロキシメチル)-1,3-プロパンジオール;ヘキサントリオール、トリメチロールプロパン、トリメチロールエタン、トリメチロールヘキサン、1,4-シクロヘキサントリメタノール、ペンタエリスリトールモノエステル、ペンタエリスリトールモノエーテル、及びこれらのいずれかのアルコキシル化類縁体からなる群から選択される。ある一定の実施形態において、アルコキシル化誘導体は、エトキシル化またはプロポキシル化化合物を含む。

## 【0384】

いくつかの実施形態において、反応性小分子は、4~6個のヒドロキシ基を有する多価アルコールを含む。ある一定の実施形態において、共反応体は、ジペンタエリスリトール(erithritol)またはそのアルコキシル化類縁体を含む。ある一定の実施形態において、共反応体は、ソルピトールまたはそのアルコキシル化類縁体を含む。

## 【0385】

ある一定の実施形態において、反応性小分子は、一般式 $(HO)_x Q(COOH)_y$ : 式中、Qは、1~12個の炭素原子を含有する直鎖または分岐状炭化水素ラジカルであり、x及びyは、それぞれ、1~3の整数である;を有するヒドロキシ-カルボン酸を含む。ある一定の実施形態において、共反応体は、ジオールカルボン酸を含む。ある一定の実施形態において、共反応体は、ビス(ヒドロキシルアルキル)アルカン酸を含む。ある一定の実施形態において、共反応体は、ビス(ヒドロキシルメチル)アルカン酸を含む。ある一定の実施形態において、ジオールカルボン酸は、2,2ビス-(ヒドロキシメチル)-プロパン酸(ジメチロールプロピオン酸、DMPA)2,2-ビス(ヒドロキシメチル)ブタン酸(ジメチロールブタン酸;DMBA)、ジヒドロキシコハク酸(酒石酸)、及び4,4'-ビス(ヒドロキシフェニル)吉草酸からなる群から選択される。ある一定の実施形態において、共反応体は、N,N-ビス(2-ヒドロキシルアルキル)カルボン酸を含む。

## 【0386】

ある一定の実施形態において、反応性小分子は、1つ以上のアミノ基を含む多価アルコールを含む。ある一定の実施形態において、反応性小分子は、アミノジオールを含む。ある一定の実施形態において、反応性小分子は、第3級アミノ基を含有するジオールを含む。ある一定の実施形態において、アミノジオールは、ジエタノールアミン(DEA)、N-メチルジエタノールアミン(MDEA)、N-エチルジエタノールアミン(EDEA)、N-ブチルジエタノールアミン(BDEA)、N,N-ビス(ヒドロキシエチル)-アミノピリジン、ジプロパノールアミン、ジイソプロパノールアミン(DIPA)、N-メチルジイソプロパノールアミン、ジイソプロパノール-p-トルイジン、N,N-ビス(ヒドロキシエチル)-3-クロロアニリン、3-ジエチルアミノプロパン-1,2-ジオール、3-ジメチルアミノプロパン-1,2-ジオール及びN-ヒドロキシエチルピペリジンからなる群から選択される。ある一定の実施形態において、共反応体は、第4級アミノ基を含有するジオールを含む。ある一定の実施形態において、第4級アミノ基を含む共反応体は、上記アミノアルコールのいずれかの酸塩または第4級化誘導体である。

## 【0387】

ある一定の実施形態において、反応性小分子は、平均約2つ以上の第1級及び/または

10

20

30

40

50



### - 着色剤

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、1つ以上の好適な着色剤を含む。多くのフォーム製品は、製造の際に色分けされ、製品グレードを特定して、黄変を隠し、または消費者製品を作製する。フォームを着色する歴史的方法は、常套の顔料または染料においてブレンドすることであった。典型的な無機着色剤は、二酸化チタン、酸化鉄及び酸化クロムを含んでいた。有機顔料は、アゾ/ジアゾ染料、フタロシアニン及びジオキサジン、ならびにカーボンブラックに由来していた。これらの着色剤が直面する典型的な課題として、高い粘度、摩耗傾向、フォーム不安定、フォームスコーチ、色の移動及び利用可能な色の限定された範囲が挙げられていた。ポリオール結合着色剤の開発における最近の進展は、以下に記載されている：

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

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

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

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

### 【0391】

#### - UV安定剤

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、1つ以上の好適なUV安定剤を含む。芳香族イソシアネートに基づくポリウレタンは、光への暴露によるエージングの際に黄色の暗い影になる。ポリウレタン風化現象のレビューは、Davis, A.; Sims, D. Weathering Of Polymers; Applied Science: London, 1983, 222-237に提示されている。黄変は、大部分のフォーム用途には問題ではない。光保護剤、例えば、ヒドロキシベンゾトリアゾール、ジブチルチオカルバミン酸亜鉛、2,6-ジ-tert-ブチルカテコール、ヒドロキシベンゾフェノン、ヒンダードアミン及びホスファイトは、ポリウレタンの光安定性を改善するのに用いられている。色顔料も成功裏に用いられている。

### 【0392】

#### - 難燃剤

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、1つ以上の好適な難燃剤を含む。低密度のオープンセル軟質ポリウレタンフォームは、大きな表面積及び高い空気透過性を有するため、十分な点火源及び酸素の適用により燃焼する。この可燃性を低減するのに難燃剤が添加される場合が多い。任意の具体的なフォームへの難燃剤の選択は、該フォームの意図される用途及び該用途を左右する付随の可燃性試験シナリオに左右される場合が多い。添加剤によって影響され得る可燃性の態様として、初期の点火性、燃焼速度及び発煙性が挙げられる。

### 【0393】

最も広範に用いられている難燃剤は、塩素化リン酸エステル、塩素化パラフィン及びメラミン粉末である。これらの及び多くの他の組成物は、専門の化学物質供給者から入手可能である。この対象のレビューは、Kuryla, W. C.; Papa, A. J. Flame Retardancy of Polymeric Materials, Vol. 3; Marcel Dekker: New York, 1975, 1-133に与えられている。

### 【0394】

#### - 抗菌剤

暖かく湿度が高いある一定の条件下では、ポリウレタンフォームは、微生物による攻撃

10

20

30

40

50

を受けやすい。これが懸念事項であるとき、細菌、酵母または菌類に対する添加剤が製造の際にフォームに添加される。ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、1つ以上の好適な静菌剤を含む。

【0395】

- 可塑剤

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、1つ以上の好適な可塑剤を含む。非反応性液体は、フォームを軟化させまたは粘度を低減させて、加工を改良するのに用いられている。軟化効果は、より低い等量のポリオールを用いることによって補償され得、これにより、より高度に架橋されたポリマー構造が得られる。これらの材料は、フォーム密度を増加させ、多くの場合、物性に悪い影響を及ぼす。

10

【0396】

- セルオープナー

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、1つ以上の好適なセルオープナーを含む。いくつかのポリウレタンフォームにおいては、冷却の際に収縮しないフォームを得るためにセルオープナーを添加することが必要である。セルの開口を誘発する公知の添加剤として、シリコーン系消泡剤、ワックス、微粉化固体、液状ペルフルオロカーボン(perfluorocarbon)、パラフィン油、長鎖脂肪酸、及び高濃度のエチレンオキシドを用いて作製されたある一定のポリエーテルポリオールが挙げられる。

【0397】

- 帯電防止剤

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、1つ以上の好適な帯電防止化合物を含む。いくつかの軟質フォームは、包装、衣類、及び静電荷の蓄積を最小限にするように電気抵抗を最小限にすることが望ましい他の用途において用いられる。このことは、イオン性金属塩、カルボン酸塩、リン酸エステル及びこれらの混合物の添加を通して常套的に達成されている。これらの剤は、本質的に導電性であることによって、または空気から水分を吸収することによってのいずれかで機能する。所望の最終結果は、フォームの表面抵抗を数桁低減させる。

20

【0398】

- 相溶化剤

ある一定の実施形態において、本発明のB側混合物は、1つ以上の好適な相溶化剤を含む。相溶化剤は、2つ以上の非混和性成分を一緒にして均一な液相を与えることを可能にする分子である。多くのかかる分子がポリウレタン業界において公知であり、アミド、アミン、炭化水素油、フタレート、ポリブチレングリコール、ウレアが挙げられる。

30

【0399】

- ある一定の実施形態

ある一定の実施形態において、本発明は、以下の項にあるように記載され得る。

1. ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含むポリウレタンフォーム組成物の耐荷重特性を増加させるための方法であって、ポリオール成分に、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを組み込むステップを含み、ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約50重量%の量で添加される、方法。

40

2. ポリオール成分が、ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、脂肪族ポリオール、及びこれらのうちいずれか2つ以上の混合物からなる群から選択される1つ以上のポリオールを含む、項1に記載の方法。

3. ポリオール成分が、ポリエーテルポリオールを実質的に含む、項1に記載の方法。

4. ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約5重量%～約25重量%の量で添加される、項1に記載の方法。

5. ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約10重量%の量で添加される、項4に記載の方法。

6. ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約10

50

重量% ~ 約 20 重量% の量で添加される、項 4 に記載の方法。

7 . ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約 20 重量% ~ 約 30 重量% の量で添加される、項 4 に記載の方法。

8 . ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約 30 重量% ~ 約 50 重量% の量で添加される、項 4 に記載の方法。

9 . 添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の ASTM D 3574 に従って測定される圧縮力撓み (CFD) 値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の CFD 値より大きい、項 1 に記載の方法。

10 . 添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の CFD 値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の CFD 値より少なくとも 10 %、少なくとも 20 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 % または少なくとも 50 % 大きい、項 9 に記載の方法。

10

11 . 添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォームの CFD 値が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いない対応するフォームの CFD 値より少なくとも 20 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 % または少なくとも 50 % 大きい、項 10 に記載の方法。

12 . CFD 値が、比較されるフォーム組成物の密度に関して標準化される、項 9 ~ 11 のいずれか一項に記載の方法。

13 . 添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物と、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物とが、実質的に同じ密度を有するように、フォーム組成物が処方される、項 9 ~ 11 のいずれか一項に記載の方法。

20

14 . フォーム組成物が、軟質ポリウレタンフォームを含む、項 1 に記載の方法。

15 . フォーム組成物が、粘弾性ポリウレタンフォームを含む、項 1 に記載の方法。

16 . フォーム組成物が、硬質ポリウレタンフォームを含む、項 1 に記載の方法。

17 . 添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の ASTM D 3574 に従って測定される密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より低く、添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の ASTM D 3574 に従って測定される圧縮力撓み (CFD) 値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の CFD 値より大きい、項 1 に記載の方法。

30

18 . 添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より少なくとも 10 % 低い、項 18 に記載の方法。

19 . 添加されるポリカーボネートポリオールを用いたフォームの密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いない対応するフォームの密度より少なくとも 20 % 低い、項 18 に記載の方法。

20 . 添加されるポリカーボネートポリオールを用いたフォームの密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いない対応するフォームの CFD 値より少なくとも 25 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 % または少なくとも 50 % 大きい、項 19 に記載の方法。

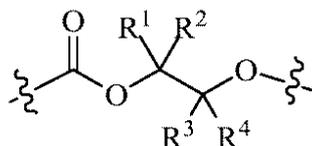
40

21 . 添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の CFD 値が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の CFD 値より少なくとも 10 % 大きい、項 17 ~ 19 のいずれか一項に記載の方法。

22 . 添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォームの CFD 値が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いない対応するフォームの CFD 値より少なくとも 20 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 % または少なくとも 50 % 大きい、項 21 に記載の方法。

23 . ポリカーボネートポリオールが、構造：

## 【化78】

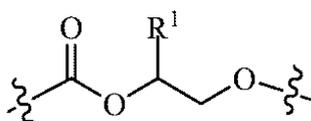


式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、 $-H$ 、フッ素、場合により置換されている $C_{1-4}$ 脂肪族基、場合により置換されている $C_{1-20}$ ヘテロ脂肪族基、及び場合により置換されているアシル基からなる群から独立して選択され、ここで、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ のうちいずれか2つ以上が、介在原子と一緒になって、1つ以上のヘテロ原子を場合により含有する1つ以上の場合により置換されている環を形成してよい；を有する第1の繰り返し単位を含有する、項1に記載の方法。

10

24. ポリカーボネートポリオールが、構造：

## 【化79】



を有する第1の繰り返し単位を含有する、項23に記載の方法。

20

25.  $R^1$ が、各出現において、ポリマー鎖中にあり、独立して、 $-H$ 、または $-CH_3$ である、項24に記載の方法。

26. ポリカーボネートポリオールが、約 $500\text{ g/mol}$ ～約 $20,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有することを特徴とする、項25に記載の方法。

27. ポリカーボネートポリオールが、約 $1,000\text{ g/mol}$ ～約 $5,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有することを特徴とする、項26に記載の方法。

28. ポリカーボネートポリオールが、約 $1,000\text{ g/mol}$ ～約 $3,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有することを特徴とする、項26に記載の方法。

29. ポリカーボネートポリオールが、約 $1,000\text{ g/mol}$ 、約 $1,200\text{ g/mol}$ 、約 $1,500\text{ g/mol}$ 、約 $2,000\text{ g/mol}$ 、約 $2,500\text{ g/mol}$ または約 $3,000\text{ g/mol}$ の $M_n$ を有することを特徴とする、項28に記載の方法。

30

30. 脂肪族ポリカーボネートポリオールは、鎖端の98%超、99%超、または99.5%超が、イソシアネートに対して反応性の基であることを特徴とする、項25に記載の方法。

31. イソシアネートに対して反応性の鎖端が、 $-OH$ 基を含む、項25に記載の方法。

32. ポリオール成分とポリイソシアネート成分との反応生成物を含むポリウレタンフォーム組成物であって、ポリオール成分が、1つ以上のエポキシド及び二酸化炭素の共重合から誘導されるポリカーボネートポリオールを含み、ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2重量%～約50重量%の量で存在し、添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物のASTM D3574に従って測定される圧縮力撓み(CFD)値が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物のCFD値より大きいことを特徴とする、ポリウレタンフォーム組成物。

40

33. ポリオール成分が、ポリエーテルポリオール、ポリエステルポリオール、脂肪族ポリオール、及びこれらのうちいずれか2つ以上の混合物からなる群から選択される1つ以上のポリオールを含む、項32に記載のポリウレタンフォーム組成物。

34. ポリオール成分が、ポリエーテルポリオールを実質的に含む、項32に記載のポリウレタンフォーム組成物。

35. ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約5重量%～約25重量%の量で存在する、項32に記載のポリウレタンフォーム組成物。

36. ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約2

50

重量% ~ 約 10 重量% の量で存在する、項 3 2 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

37 . ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約 10 重量% ~ 約 20 重量% の量で存在する、項 3 2 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

38 . ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約 20 重量% ~ 約 30 重量% の量で存在する、項 3 2 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

39 . ポリカーボネートポリオールが、ポリオール成分中に存在する全ポリオールの約 30 重量% ~ 約 50 重量% の量で存在する、項 3 2 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

40 . ポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の C F D 値が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の C F D 値より少なくとも 10 % 大きい、項 3 2 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

10

41 . ポリカーボネートポリオールを用いたフォームの C F D 値が、ポリカーボネートポリオールを用いない対応するフォームの C F D 値より少なくとも 20 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 % または少なくとも 50 % 大きい、項 4 0 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

42 . C F D 値が、比較されるフォーム組成物の密度に関して標準化される、項 4 0 または 4 1 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

43 . 添加されるポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物と、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物とが、実質的に同じ密度を有するように、フォーム組成物が処方される、項 4 0 または 4 1 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

20

44 . フォーム組成物が、軟質ポリウレタンフォームを含む、項 3 2 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

45 . フォーム組成物が、粘弾性ポリウレタンフォームを含む、項 3 2 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

46 . フォーム組成物が、硬質ポリウレタンフォームを含む、項 3 2 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

47 . ポリカーボネートポリオールを含むフォーム組成物の A S T M D 3 5 7 4 に従って測定された密度が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より低い、項 3 2 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

48 . ポリカーボネートポリオールを含むフォームの密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の密度より少なくとも 10 % 低い、項 4 7 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

30

49 . 添加されるポリカーボネートポリオールを用いたフォームの密度が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いない対応するフォーム組成物の C F D 値より少なくとも 20 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 % または少なくとも 50 % 大きい、項 4 7 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

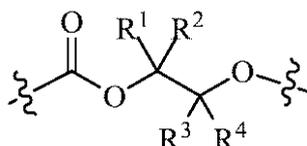
50 . 測定される C F D 値が、ポリカーボネートポリオールを欠く対応するフォーム組成物の C F D 値より少なくとも 10 % 大きい、項 4 7 ~ 4 9 のいずれかに記載のポリウレタンフォーム組成物。

51 . ポリカーボネートポリオールを用いたフォームの C F D 値が、添加されるポリカーボネートポリオールを用いない対応するフォームの C F D 値より少なくとも 20 %、少なくとも 30 %、少なくとも 40 % または少なくとも 50 % 大きい、項 5 0 に記載のポリウレタンフォーム組成物。

40

52 . ポリカーボネートポリオールが、構造：

【化 8 0】

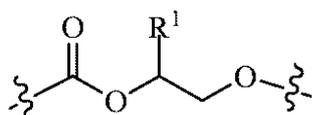


50

式中、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、 $-H$ 、フッ素、場合により置換されている $C_{1-40}$ 脂肪族基、場合により置換されている $C_{1-20}$ ヘテロ脂肪族基、及び場合により置換されているアリール基からなる群から独立して選択され、ここで、 $R^1$ 、 $R^2$ 、 $R^3$ 、及び $R^4$ のうちいずれか2つ以上が、介在原子と一緒にあって、1つ以上のヘテロ原子を場合により含有する1つ以上の場合により置換されている環を形成してよい；を有する第1の繰り返し単位を含有する、項32に記載のポリウレタンフォーム組成物。

53. ポリカーボネートポリオールが、構造：

【化81】



10

を有する第1の繰り返し単位を含有する、項32に記載のポリウレタンフォーム組成物。

54.  $R^1$ が、各出現において、ポリマー鎖中にあり、独立して、 $-H$ 、または $-CH_3$ である、項32に記載のポリウレタンフォーム組成物。

55. ポリカーボネートポリオールが、約500 g/mol ~ 約20,000 g/molのMnを有することを特徴とする、項54に記載のポリウレタンフォーム組成物。

56. ポリカーボネートポリオールが、約1,000 g/mol ~ 約5,000 g/molのMnを有することを特徴とする、項55に記載のポリウレタンフォーム組成物。

20

57. ポリカーボネートポリオールが、約1,000 g/mol ~ 約3,000 g/molのMnを有することを特徴とする、項55に記載のポリウレタンフォーム組成物。

58. ポリカーボネートポリオールが、約1,000 g/mol、約1,200 g/mol、約1,500 g/mol、約2,000 g/mol、約2,500 g/molまたは約3,000 g/molのMnを有することを特徴とする、項55に記載のポリウレタンフォーム組成物。

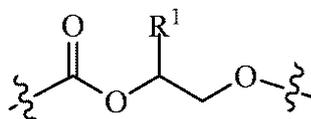
59. ポリカーボネートポリオールは、鎖端の98%超、99%超、または99.5%超が、イソシアネートに対して反応性の基であることを特徴とする、項55に記載のポリウレタンフォーム組成物。

60. イソシアネートに対して反応性の鎖端が、 $-OH$ 基を含む、項59に記載のポリウレタンフォーム組成物。

30

61. ポリオール成分とポリイソシアネート成分との間の反応生成物を含む座席用フォームであって、ポリオール成分が、約5重量% ~ 約20重量%の、構造：

【化82】



式中、

$R^1$ は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、独立して、 $-H$ 、または $-CH_3$ である；を有する第1の繰り返し単位を有するポリカーボネートポリオールを含み、

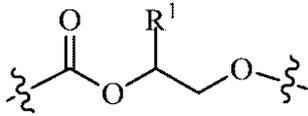
40

ポリカーボネートポリオールが、約1,000 g/mol ~ 約5,000 g/molのMnを有し；

ポリカーボネートポリオールは、鎖端の99%超が、イソシアネートに対して反応性である基であることを特徴とする、座席用フォーム。

62. イソシアネート成分とポリオール成分との間の反応生成物を含む粘弾性フォーム物品であって、ポリオール成分が、約5重量% ~ 約20重量%の、構造：

【化 8 3】



式中、

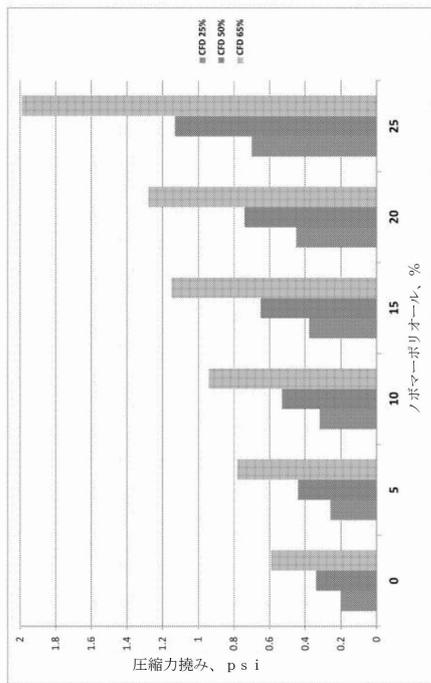
R<sup>1</sup> は、各出現において、ポリマー鎖中にあり、独立して、-H、または-CH<sub>3</sub>である；を有する第1の繰り返し単位を有するポリカーボネートポリオールを含み、

ポリカーボネートポリオールが、約1,000g/mol~約5,000g/molのM<sub>n</sub>を有し；

10

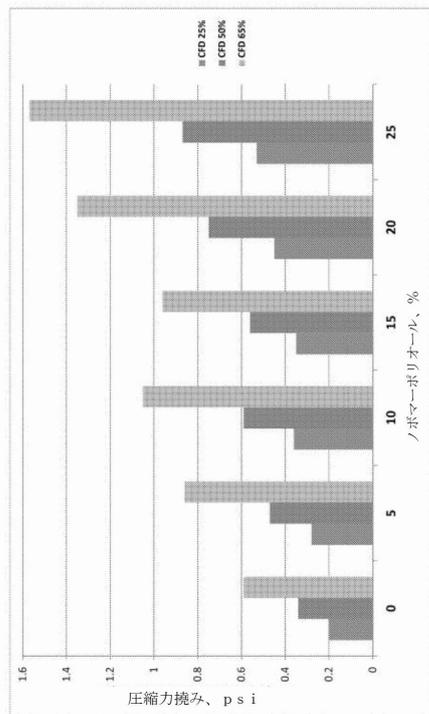
ポリカーボネートポリオールは、鎖端の99%超が、イソシアネートに対して反応性である基であることを特徴とする、粘弾性フォーム物品。

【図 1】



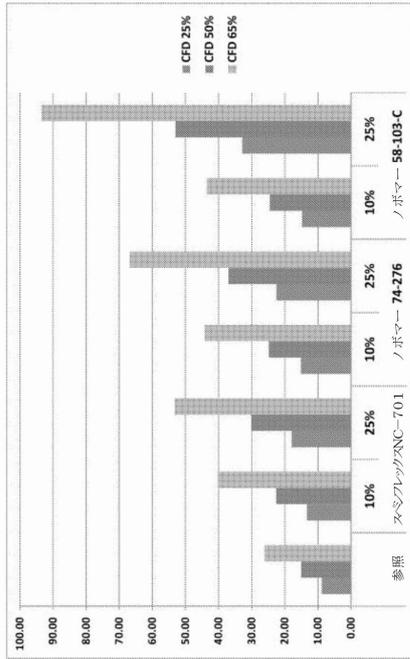
ノボマー58-103-Cポリオールを基剤とするPUフォームの耐荷重特性 (表3 Aおよび3 B)

【図 2】



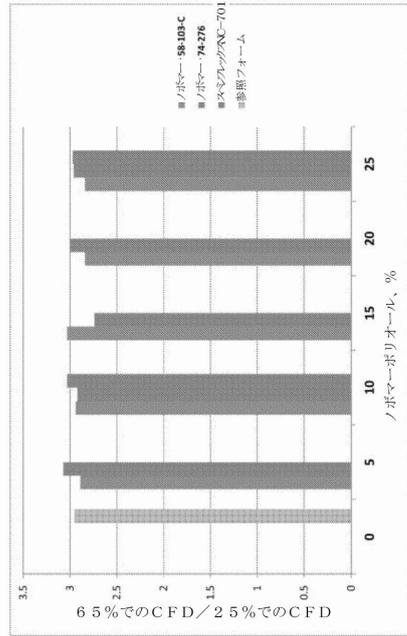
ノボマー74-276ポリオールを基剤とするPUフォームの耐荷重特性 (表4)

【 図 3 】



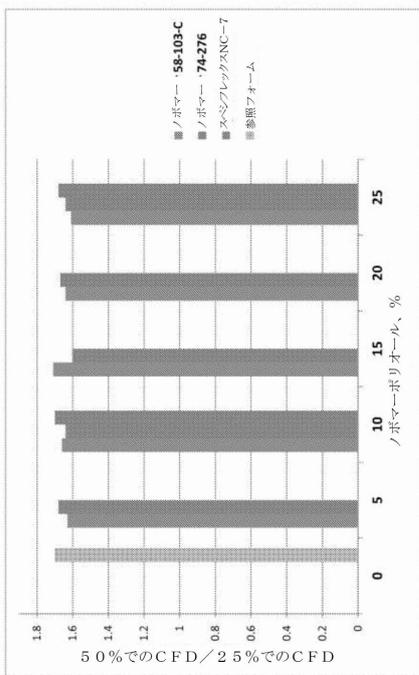
市販のポリオールおよびノボマーポリオールを基剤とするPUフォームの耐荷重特性 (標準化した値) (表3~5)

【 図 4 】



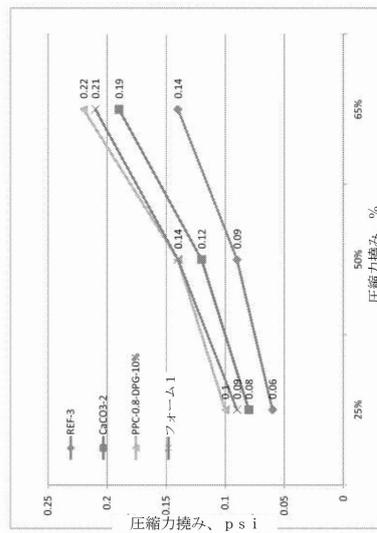
ノボマーポリオールおよび市販のポリオールを基剤とするPUフォームのSAG因子 (表3~5)

【 図 5 】



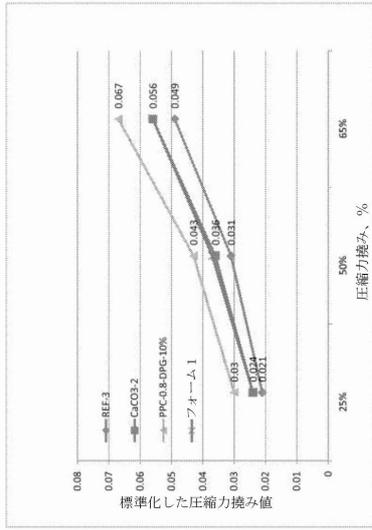
ノボマーポリオールおよび市販のポリオールを基剤とするPUフォームのSAG因子 (表3~5)

【 図 6 】



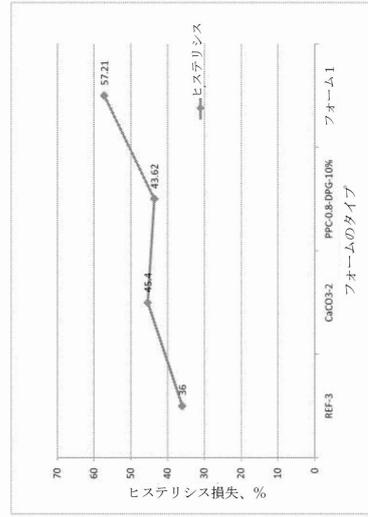
弾塑性フォームのCFDに及ぼすノボマーPPC-0, 8-DPG (対りオール74-217) の影響:  
 REF-3 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 CaCO3-2 - 充填剤としてのCaCO<sub>3</sub>を用いて調製された参照フォーム (表2B~5B内の#2)  
 PPC-0, 8-DPG-10% - 10%ノボマーポリオールを用いて調製されたフォーム (表3B内の#3)  
 フォーム1 - 10%ノボマーポリオールと、充填剤としてのCaCO<sub>3</sub>とを用いて調製されたフォーム (表3B内の#5)

【 図 7 】



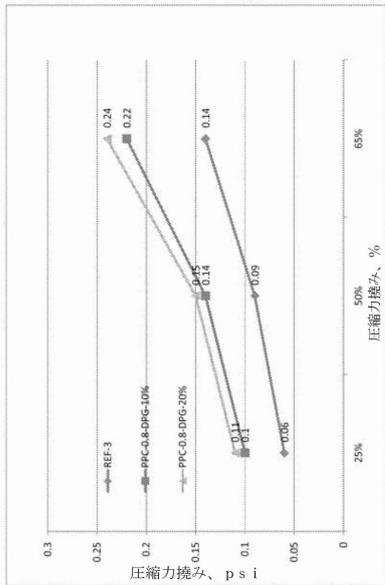
参照粘弾性フォームおよびPPC-0.8-DPGがボナーポリオール(74-217)を基剤とする粘弾性フォームの標準化したCFD値：  
 REF-3 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 CaCO3-2 - 充填剤としてのCaCO<sub>3</sub>を用いて調製された参照フォーム (表2B~5B内の#2)  
 PPC-0.8-DPG-10% - 10%ボナーポリオールを用いて調製されたフォーム (表3B内の#3)  
 フォーム1 - 10%ボナーポリオールと、充填剤としてのCaCO<sub>3</sub>と、を用いて調製されたフォーム (表3B内の#5)

【 図 8 】



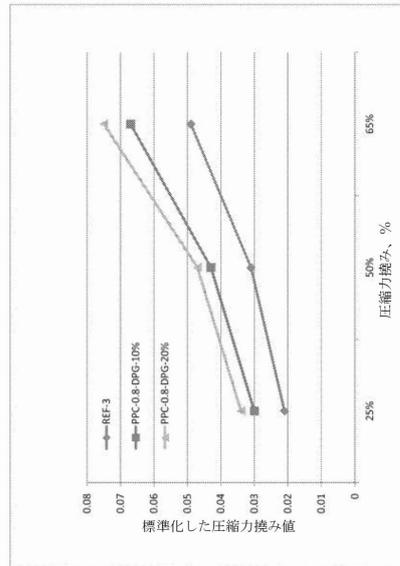
粘弾性フォームのヒステリシスに及ぼすボナーPPC-0.8-DPGポリオール(74-217)の影響：  
 REF-3 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 CaCO3-2 - 充填剤としてのCaCO<sub>3</sub>を用いて調製された参照フォーム (表2B~5B内の#2)  
 PPC-0.8-DPG-10% - 10%ボナーポリオール74-217を用いて調製されたフォーム (表3B内の#3)  
 フォーム1 - 10%ボナーポリオール74-217と、充填剤としてのCaCO<sub>3</sub>と、を用いて調製されたフォーム (表3B内の#5)

【 図 9 】



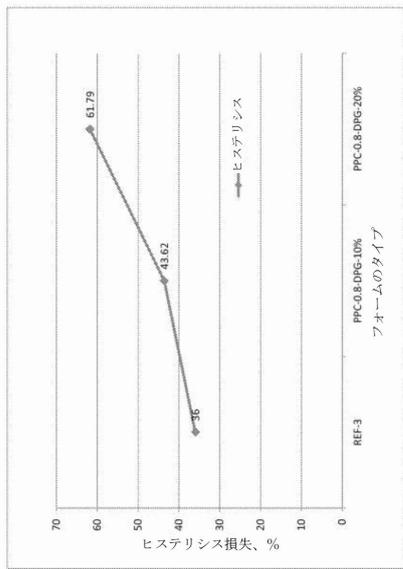
粘弾性フォームのCFDに及ぼすノボナーPPC-0.8-DPG(74-217)ポリオールの影響：  
 REF-3 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 PPC-0.8-DPG-10% - 10%ボナーポリオール74-217を用いて調製されたフォーム (表3B内の#3)  
 PPC-0.8-DPG-20% - 20%ボナーポリオール74-217を用いて調製されたフォーム (表3B内の#4)

【 図 10 】



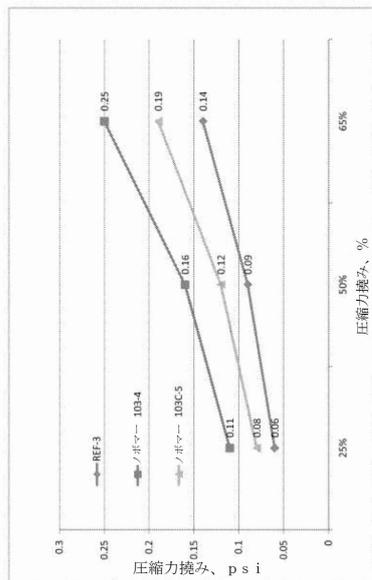
参照フォームおよびノボナーPPC-0.8-DPGポリオール(74-217)を基剤とするフォームの標準化したCFD値：  
 REF-3 - 参照フォーム (表2~5内の#1)  
 PPC-0.8-DPG-10% - 10%ボナーポリオール74-217を用いて調製されたフォーム (表3B内の#3)  
 PPC-0.8-DPG-20% - 20%ボナーポリオール74-217を用いて調製されたフォーム (表3B内の#4)

【 図 1 1 】



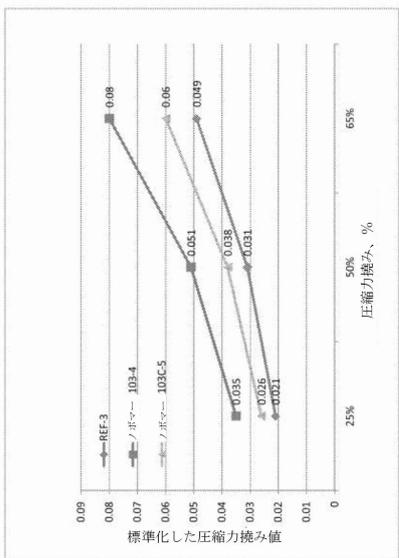
粘弾性フォームのヒステリシスに及ぼすポリア-PPC-0.8-DPG (74-217) ポリオールの影響：  
 REF-3 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 PPC-0.8-DPG-10% - 10%ポリア-ポリオール74-217を用いて調製されたフォーム (表3B(9)の#3)  
 PPC-0.8-DPG-20% - 20%ポリア-ポリオール74-217を用いて調製されたフォーム (表3B(9)の#4)

【 図 1 2 】



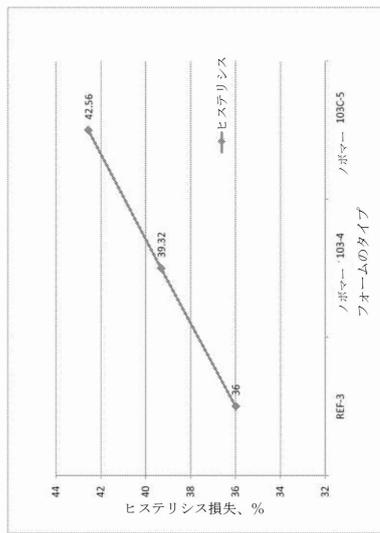
粘弾性フォームのCFDに及ぼすポリア-PPC-1.2-DPG(ポリオール58-103-C)の影響：  
 REF-3 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 103-4 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 103C-5 - 10%ポリア-ポリオール58-103-Cを用いて調製されたフォーム (表2B-1(9)の#6)  
 103C-5 - 18%ポリア-ポリオール58-103-Cを用いて調製されたフォーム (表2B-2(9)の#3)

【 図 1 3 】



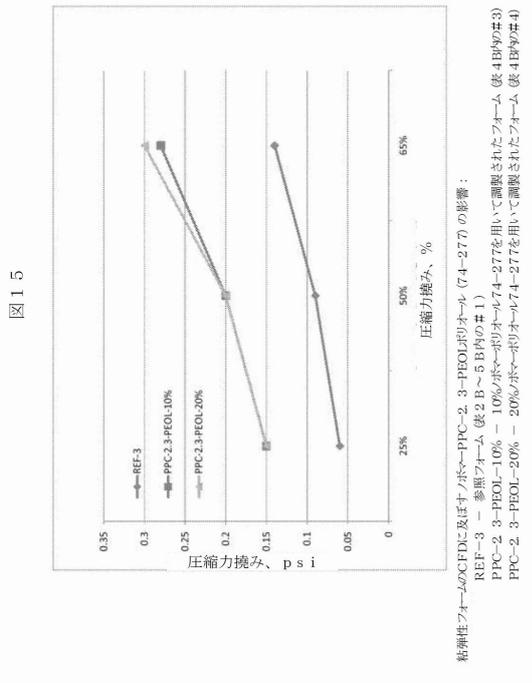
参照VEフォームおよびポリア-PPC-1.2-DPG (58-103-C) ポリオールを基調とするVEフォームの標準化したCFD値：  
 REF-3 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 103-4 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 103C-5 - 10%ポリア-ポリオール58-103-Cを用いて調製されたフォーム (表2B-1(9)の#6)  
 103C-5 - 18%ポリア-ポリオール58-103-Cを用いて調製されたフォーム (表2B-2(9)の#3)

【 図 1 4 】

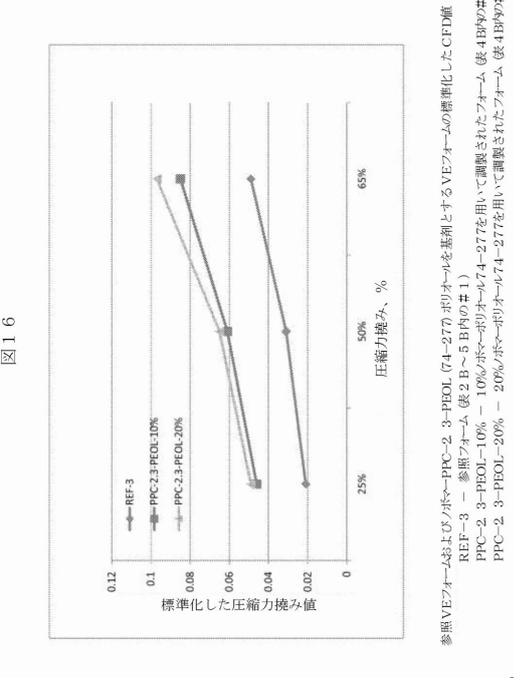


粘弾性フォームのヒステリシスに及ぼすポリア-PPC-1.2-DPG(ポリオール58-103-C)の影響：  
 REF-3 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 103-4 - 参照フォーム (表2B~5B内の#1)  
 103C-5 - 10%ポリア-ポリオール58-103-Cを用いて調製されたフォーム (表2B-1(9)の#6)  
 103C-5 - 18%ポリア-ポリオール58-103-Cを用いて調製されたフォーム (表2B-2(9)の#3)

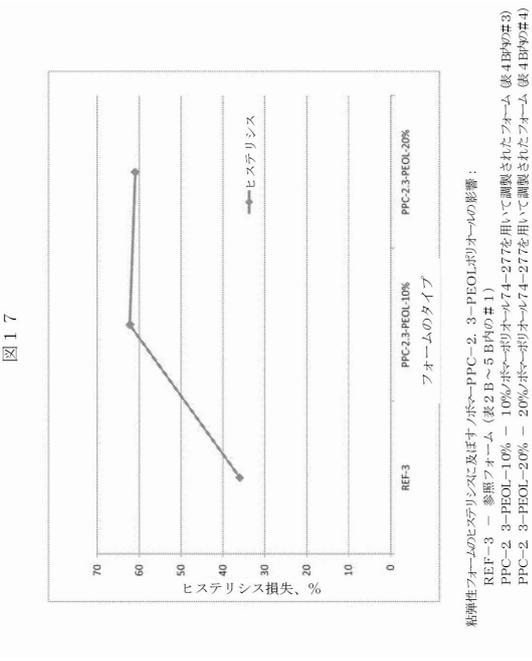
【 図 15 】



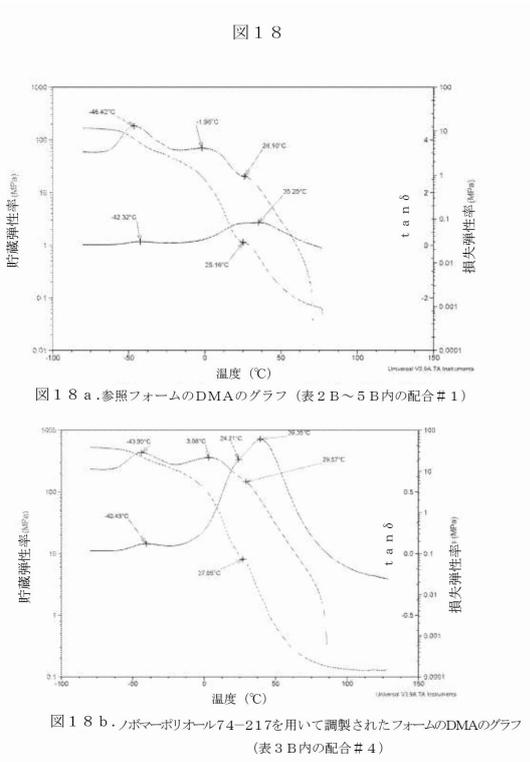
【 図 16 】



【 図 17 】



【 図 18 】



【 図 1 9 】

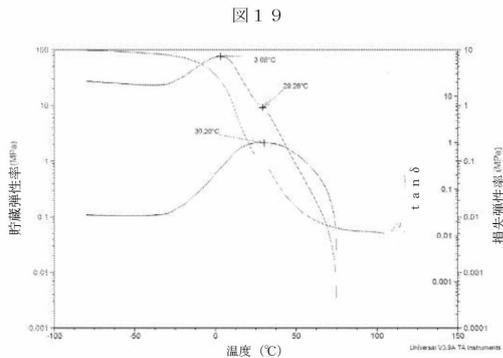


図 1 9 a . ノボマー58-103-Cポリオールを用いて調製されたフォームのDMAのグラフ (表 2 B-1 内の配合 # 3)

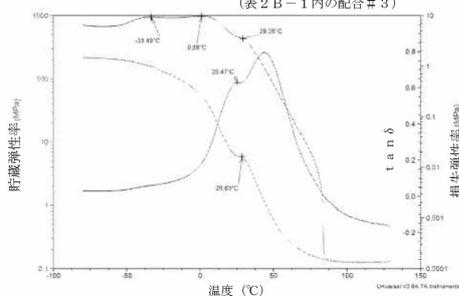


図 1 9 b . ノボマー58-103-Cポリオールを用いて調製されたフォームのDMAのグラフ (表 4 B 内の配合 # 4)

【 図 2 0 】

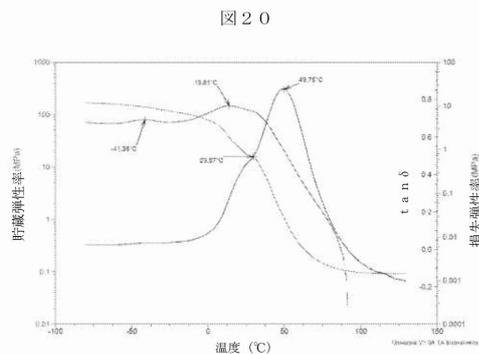


図 2 0 a . 3 種の異なるノボマーポリオールの混合物を用いて調製されたフォームのDMAのグラフ (表 5 B 内の配合 # 5)

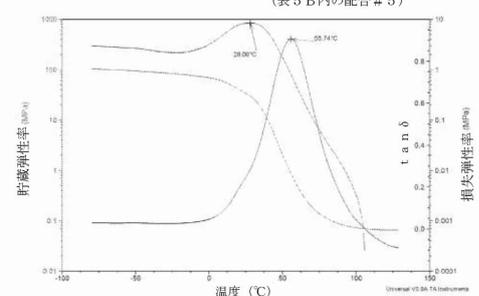


図 2 0 b . 3 種の異なるノボマーポリオールの混合物を用いて調製されたフォームのDMAのグラフ (表 5 B 内の配合 # 6)

【 図 2 1 】

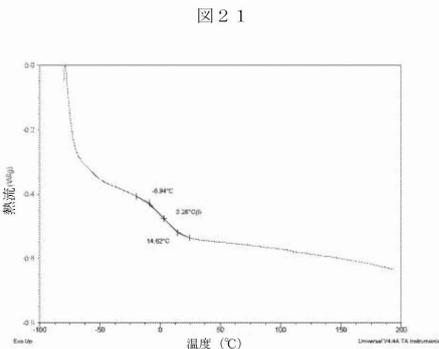


図 2 1 a . 参照フォームのDSCのグラフ (表 2 B ~ 5 B 内の配合 # 1)

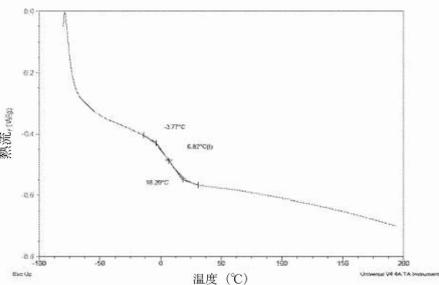


図 2 1 b . ノボマーポリオール74-217を用いて調製されたフォームのDSCのグラフ (表 3 B 内の配合 # 4)

【 図 2 2 】

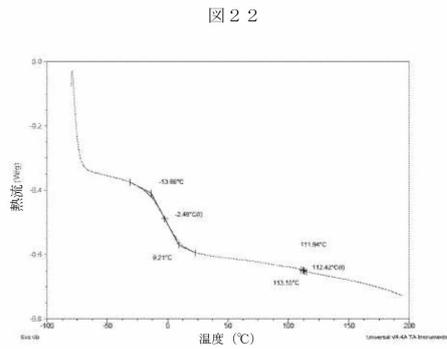


図 2 2 a . ノボマーポリオール58-103-Cを用いて調製されたフォームのDSCのグラフ (表 2 B-1 内の配合 # 3)

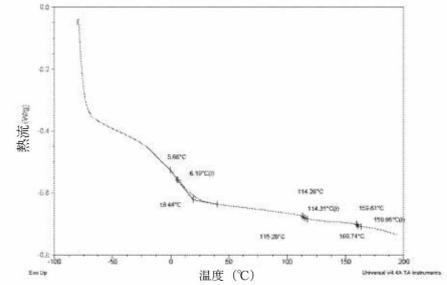
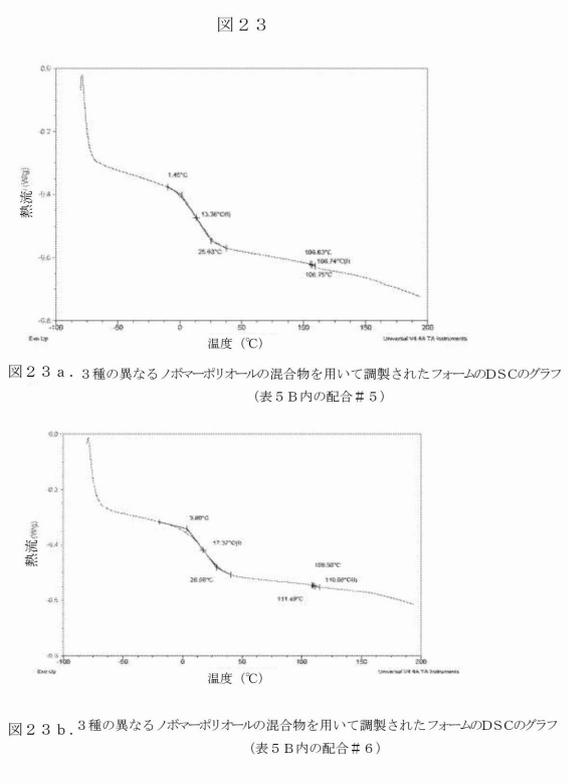
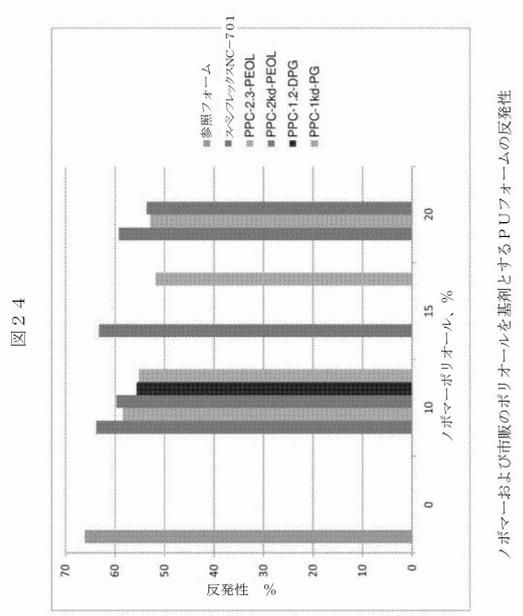


図 2 2 b . ノボマーポリオール74-277を用いて調製されたフォームのDSCのグラフ (表 4 B 内の配合 # 4)

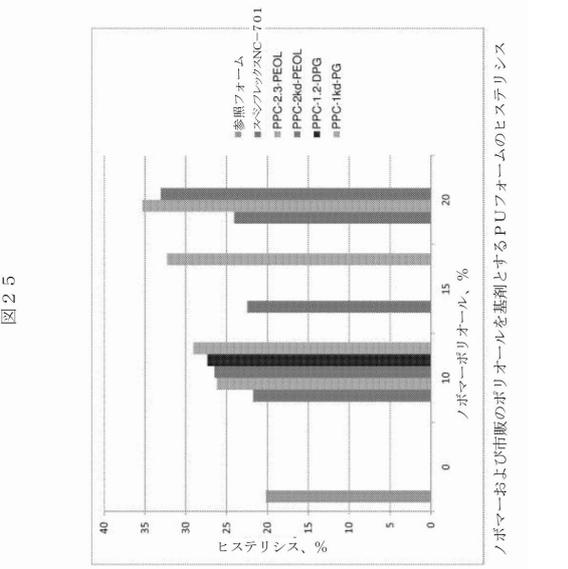
【 図 2 3 】



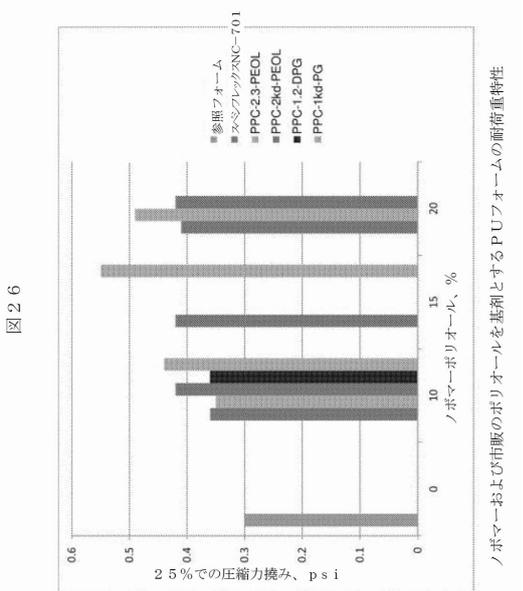
【 図 2 4 】



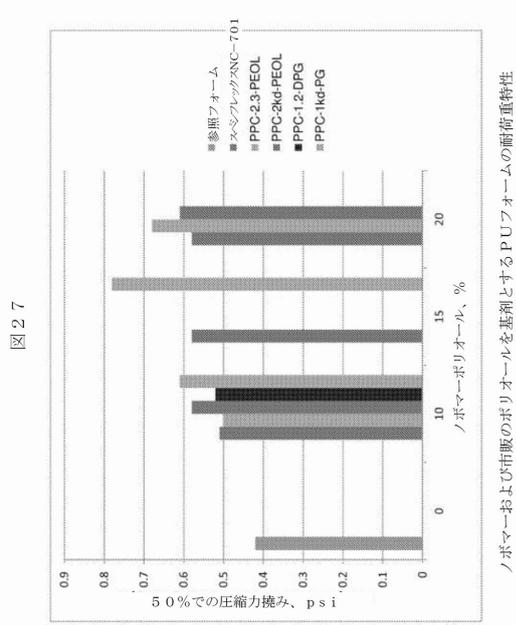
【 図 2 5 】



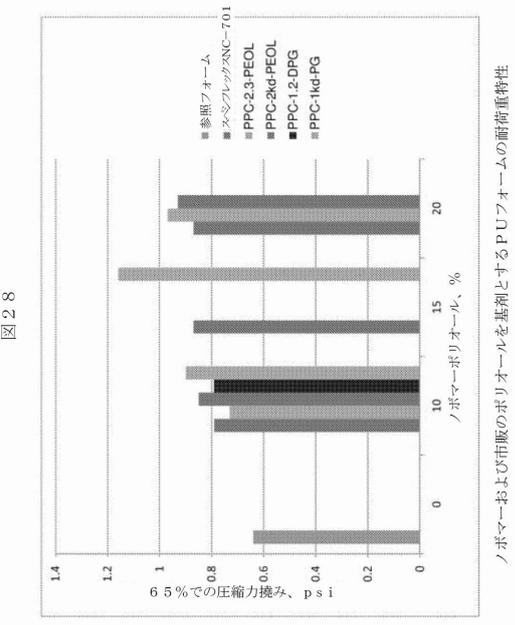
【 図 2 6 】



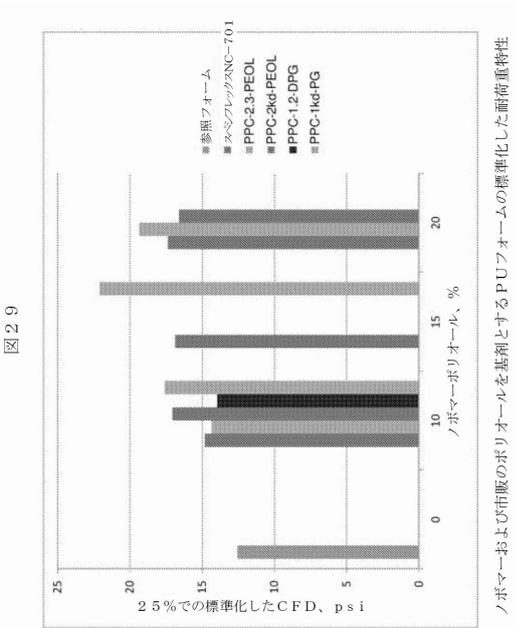
【 図 27 】



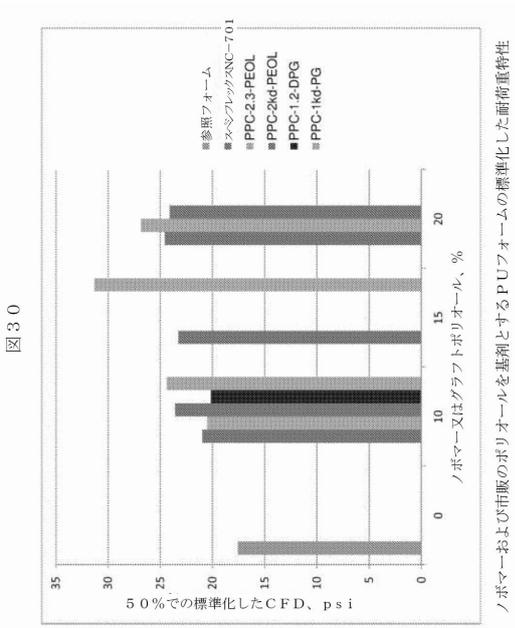
【 図 28 】



【 図 29 】



【 図 30 】





## フロントページの続き

(31)優先権主張番号 61/731,723

(32)優先日 平成24年11月30日(2012.11.30)

(33)優先権主張国・地域又は機関  
米国(US)

(31)優先権主張番号 61/758,500

(32)優先日 平成25年1月30日(2013.1.30)

(33)優先権主張国・地域又は機関  
米国(US)

(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 14850, イサカ, ダンビー ロード 950, ノボマ  
ー, インコーポレイテッド 気付

(72)発明者 センディジャレビク, バヒド  
アメリカ合衆国 ニューヨーク 14850, イサカ, ダンビー ロード 950, ノボマ  
ー, インコーポレイテッド 気付

(72)発明者 センディジャレビク, アイサ  
アメリカ合衆国 ニューヨーク 14850, イサカ, ダンビー ロード 950, ノボマ  
ー, インコーポレイテッド 気付

## 合議体

審判長 大熊 幸治

審判官 佐藤 健史

審判官 橋本 栄和

(56)参考文献 国際公開第2012/080192(WO, A1)

特表2014-503631(JP, A)

特開平7-188376(JP, A)

特表2012-502143(JP, A)

特開2008-274051(JP, A)

特開2006-104404(JP, A)

特開2005-290202(JP, A)

特表2001-503469(JP, A)

(58)調査した分野(Int.Cl., DB名)

C08G18/00-18/87