

(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(51) Int. Cl. <sup>6</sup> C08G 18/48	(45) 공고일자 2003년03월 15일
	(11) 등록번호 10-0367916
	(24) 등록일자 2002년12월30일
(21) 출원번호 10-1996-0703195	(65) 공개번호 특1996-0706518
(22) 출원일자 1996년06월 17일	(43) 공개일자 1996년 12월09일
번역문제출일자 1996년06월 17일	
(86) 국제출원번호 PCT/US1994/14495	(87) 국제공개번호
(86) 국제출원일자 1994년 12월09일	(87) 국제공개일자
(81) 지정국	국내특허 : 기네 오스트레일리아 바베이도스 불가리아 브라질 캐나다 체코 헝가리 일본 대한민국 스리랑카 마다가스카르 몽고 노르웨이 모잠비크 폴란드 루마니아 슬로바키아 우크라이나 중국 에스토니아 그루지야 라이베리아 리투아니아 AP ARIPO특허 : 말라위 수단 케냐 EA 유라시아특허 : 벨라루스 카자흐스탄 러시아 아르메니아 키르기스 EP 유럽특허 : 오스트리아 스위스 리히텐슈타인 독일 덴마크 스페인 핀란드 영국 룩셈부르크 네덜란드 포르투갈 스웨덴 OA OAPI특허 : 코트디부아르
(30) 우선권주장	08/169477 1993년12월 17일 미국(US) 08/342299 1994년11월 23일 미국(US)
(73) 특허권자	다우 글로벌 테크놀로지스 인크. 미국 48674 미시건주 미들랜드 워싱턴스트리트 빌딩 1790
(72) 발명자	데브쿠마르 바타차지 미합중국 텍사스 77566 레이크 잭슨 워터릴리 코트 54 웨렌 에이. 카플란 미합중국 일리노이 60030 그레이슬레이크 타일러튼서클 927 제람 비. 니콜스 미합중국 텍사스 77511 앨빈 박스 331 루트 2 본 엠. 나세 미합중국 텍사스 77566 레이크 잭슨 카네이션 스트리트 111
(74) 대리인	이병호

**심사관 : 백승준**

**(54) 비실리콘계면활성제를 함유하는 제형으로부터 제조한 폴리소시아네이트계 중합체 및 그의 제조방법**

**명세서**

**기술분야**

<1> 본원은 1993년 12월 17일자로 출원되어 현재 미합중국 특허상표청에 계류중인, "비실리콘 계면활성제(non-silicone surfactant)를 포함하는 제형으로부터 제조한 폴리소시아네이트계 중합체 및 그의 제조방법"이란 명칭의 미합중국 특허원 제08/169,477호의 일부 계속 출원이다.

**배경기술**

<2> 본 발명은 비실리콘 계면활성제를 함유하는 제형으로부터 제조한 폴리소시아네이트계 중합체에 관한 것이다. 본 발명은 특히 비실리콘 계면활성제를 함유하는 제형으로부터 제조한 폴리우레탄, 폴리소시아누레이트 및 폴리우레아 발포체에 관한 것이다.

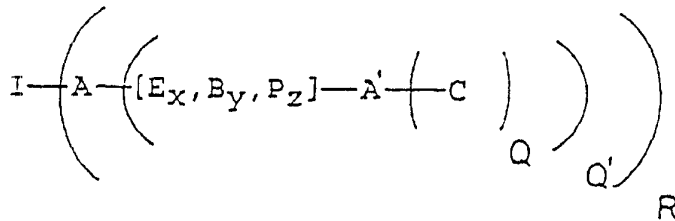
<3> 폴리소시아네이트계 중합체는 유용한 것으로 공지되어 있다. 메틸렌 디페닐 디이소시아네이트(MDI)와 톨루엔 디이소시아네이트(TDI)는 유용한 단량체성 폴리소시아네이트이다. 중합체성 이소시아네이트, 특히 중합체성 메틸렌 디페닐 디이소시아네이트(중중, 폴리메틸렌 폴리페닐 폴리소시아네이트라고도 하며, 이후에는 PMDI라고 함)는 매우 유용한 중합체성 중간체 물질이다. 이들은 주로 열경화성 및 열가소성 중합체 탄성중합체, 및 경질 및 연질 폴리우레탄, 폴리우레아 및 폴리소시아누레이트 발포체 중의 성분으로서 사용된다. 폴리소시아네이트계 탄성중합체는 반응 사출 성형된 자동차 차체 부품, 사출 성형된 스키이트보드 휘일 및 압출 성형된 일회용 기저귀 성분과 같은 용도에 유용하다.

<4> 중합체성 이소시아네이트는 이를 사용하여 제조한 발포체의 우수한 절연 특성 때문에 특히 가치가 있다. 이들 절연 발포체는 건축 재료로부터 냉장고 및 냉동기의 용도 뿐만 아니라 산업 용도[예: 파이프 및 용기 절연]에 이르는 범위에 걸친 용도에서 발견할 수 있다. 이러한 발포체는 통상 경질이다.

- <5> 연질 폴리우레탄 발포체는 다양한 용도, 예를 들면, 침구, 가구 쿠션, 자동차 시트, 의자 베개, 계기판(dashboard), 패키징, 완구 등에서 사용된다. 이러한 발포체는 일반적으로 발포체의 존재하에 및 종종 미량의 가교결합제의 존재하에 공칭 이관능성 또는 삼관능성의 고당량 폴리올을 폴리이소시아네이트와 반응시킴으로써 제조한다.
- <6> 이들 발포체는 일반적으로 이들의 제조방법에 따라 2가지 유형으로 분류된다. 성형된 발포체는 소정 형태의 발포체를 제조하기 위해 밀폐식 금형속에서 폴리우레탄 형성 성분들을 반응시킴으로써 제조한다. 대조적으로, 슬랩 재료 발포체(slab-stork foam)는 발포 성분들을 이들의 자체 중량에 대하여 자유 발포시킴으로써 제조한다.
- <7> 반응물 중의 하나가 폴리이소시아네이트인 중합체 발포체를 제조하는 기술 분야에서는 반응 혼합물을 상용화하고 형성되는 발포체를 안정화하기 위해 계면 활성제를 사용하는 것이 공지되어 있다. 종종, 이들 계면활성제는 실리코계이다. 예를 들면, 몬스트리(Monstrey) 등의 미합중국 특허 제5,064,872호에는, 폴리알킬실록산 폴리에테르 공중합체 발포체 안정화제를 포함하는 제형으로부터 폴리이소시아네이트 발포체를 제조하는 방법이 기재되어 있다. 스코트(scott)등의 미합중국 특허 제 4,097,406호 및 제4,172,186호에는, 실리콘 테트라알라이드를 물 및 알콜과 반응시킨 다음 폴리에테르 폴리올로 에스테르 전환 반응시켜 수득한 반응 생성물을 포함하는 제형으로부터 폴리우레탄 발포체를 제조하는 방법이 기재되어 있다.
- <8> 중합체 제형에 안정화제로서 실리콘 계면활성제를 사용하는 것은 매우 일반적인 것이지만, 이는 모든 용도에서 최량의 해결책은 아니다. 실리콘 계면활성제의 한 가지 단점은 이의 비용이다. 실리콘 계면활성제 물질은 종종 중합체 제형에서 가장 고가의 성분들 중의 하나이다. 따라서, 실리콘 계면활성제보다 비용이 상당히 더 저렴하고 이를 사용하여 제조한 발포체와 대략 동일한 특성을 부여하는 비실리콘 계면활성제를 제형에 포함시키는 것이 폴리이소시아네이트를 포함하는 제형으로부터 중합체를 제조하는 기술분야에서 바람직하다.

### 발명의 상세한 설명

- <9> 하나의 양태에서, 본 발명은 다관능성 활성 수소 함유 화합물(A), 임의의 발포제(B), 임의의 촉매(C) 및 비실리콘 계면활성제(D)[여기서, 계면활성제는 옥시에틸렌 단위 약 10 내지 약 90중량%와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위 약 10 내지 약 90중량%를 갖는 폴리에테르이고 옥시프로필렌 단위를 실질적으로 포함하지 않는다]를 함유하는 활성 수소 함유 조성물에 관한 것이다.
- <10> 또 다른 양태에서, 본 발명은 폴리이소시아네이트(1), 다관능성 활성 수소 함유 화합물(2), 임의의 발포제(3), 임의의 촉매(4) 및 비실리콘 계면활성제(5)[여기서, 계면활성제는 옥시에틸렌 단위 약 10 내지 약 90중량%와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위 약 10 내지 약 90중량%를 갖는 폴리에테르이고 옥시프로필렌 단위를 실질적으로 포함하지 않는다]를 포함하는 제형으로부터 제조한 중합체이다.
- <11> 본 발명의 또 다른 양태는 폴리이소시아네이트(1), 다관능성 활성 수소 함유 화합물(2), 임의의 발포제(3), 임의의 촉매(4) 및 비실리콘 계면활성제(5)[여기서, 계면활성제는 옥시에틸렌 단위 약 10 내지 약 90중량%와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위 약 10 내지 약 90중량%를 갖는 폴리에테르이고 옥시프로필렌 단위를 실질적으로 포함하지 않는다]를 포함하는 중합체 제형을 혼합함을 포함하는 중합체의 제조 방법이다.
- <12> 본 발명의 여전히 또 다른 양태에서, 본 발명은, 폴리이소시아네이트(1), 다관능성 활성 수소 함유 화합물(2), 발포제(3), 임의의 촉매(4) 및 비실리콘 계면활성제(5)를 포함하는 제형으로부터 중합체 발포체를 제조하는 방법에 있어서, 비실리콘 계면활성제가 옥시에틸렌 단위 약 10 내지 약 90중량%와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위 약 10 내지 약 90중량%를 갖는 폴리에테르이고 옥시프로필렌 단위를 실질적으로 포함하지 않음을 특징으로 하는 방법이다.
- <13> 본 발명은 또한 옥시에틸렌 단위 약 10 내지 약 90중량%와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위 약 10 내지 약 90중량%를 갖고 옥시프로필렌 단위를 실질적으로 포함하지 않는 폴리에테르를 아민 또는 하이드록시 반응성 물질로 캡핑(capping)시킴을 포함하는 방법으로 제조한 조성물이다.
- <14> 본 발명의 또 다른 양태는 다음 일반식을 갖는 물질의 조성물이다.



- <15>
- <16> 상기식에서,
- <17> I는 개시제의 비알콕시 반응성 부분이고,
- <18> A 및 A'는 독립적으로 0, N 또는 NH이며,
- <19> E는 옥시에틸렌 그룹이고,
- <20> B는 옥시부틸렌 그룹이며,
- <21> P는 옥시프로필렌 그룹이고,

- <22> x 및 y는 x:y의 비가 1:4 내지 4:1로 되도록 하는 값이며,
- <23> z는 옥시프로필렌 단위의 총 중량이 옥시에틸렌 단위와 옥시부틸렌 단위의 총 중량의 10% 미만으로 되도록 하는 값이고,
- <24> R은 개시제의 관능가에 따라 1 내지 8이며,
- <25> Q 및 Q'는 독립적으로 A 또는 A'가 0 또는 NH인 경우에는 1이고, A 또는 A'가 N인 경우에는 2이며,
- <26> 화합물의 총 분자량은 750 내지 11,000이고,
- <27> C는 캡핑 화합물의 잔기이며,
- <28> E 및 B는 실질적으로 블록으로 존재한다.

### 도면의 간단한 설명

- <29> 하나의 양태에서, 본 발명은 폴리이소시아네이트(1), 다관능성 활성 수소 함유 화합물(2), 임의의 발포제(3), 임의의 촉매(4) 및 비실리콘 계면활성제(5)를 포함하는 제형으로부터 제조한 중합체이다. 본 발명의 제형으로부터 제조할 수 있는 중합체는 폴리우레탄, 폴리이소시아누레이트, 폴리우레탄 개질된 폴리이소시아누레이트, 폴리우레아 등이 있지만, 이에 제한되지는 않는다. 중합체는 탄성중합체, 경질 발포체 또는 연질 발포체일 수 있다. 이들 물질 모두는 임의로 발포제의 존재하에 폴리이소시아네이트 및 활성 수소 함유 물질을 반응시킴으로써 형성할 수 있다.
- <30> 계면활성제는 종종 중합체 제형에서 중요한 성분일 수 있다. 본 발명의 비실리콘 계면활성제는 두 가지 이상의 중요한 기능을 발휘할 수 있다. 계면활성제는 폴리이소시아네이트를 기타의 제형 성분과 상용화시키는 작용을 할 수 있다. 이는 미세한 발포체 기포 크기가 필요한 발포체 제형, 예를 들면, 발포체가 절연 기능을 발휘할 수 있는 응용 발포체의 경우에는 특히 중요하다. 계면활성제는 폴리이소시아네이트와 기타 제형 성분을 완전히 혼합시키는 작용을 하고, 발포제는 특히 매우 작은 기포들이 최종적으로 발포체를 형성하는 거품을 구성하도록 반응 혼합물 속에 완전히 분산된다.
- <31> 계면활성제는 또한 발포체를 안정화시키는 작용을 할 수 있다. 이러한 작용은 경질 발포체 용도에서 특히 중요하다. 반응 혼합물 중에 거품이 형성됨에 따라, 이를 지지하기 위해 충분한 중합체 분자량이 확립될 때까지 불안정화시킨다. 안정화되지 않은 제형에서, 거품의 기포는 파괴되어 발포체에 절연 특성을 부여하는 작용을 하는 기체들을 방출시킨다. 마찬가지로, 발포되어 형성되는 거품의 중량은 안정화되지 않은 발포체 제형에서 너무 빠르게 확립되어 발포체가 자체 중량하에서 파괴될 수 있다. 발포체를 안정화시킬 때에, 본 발명의 비실리콘 계면활성제는 거품의 기포가 파괴되는 것을 억제하는 작용을 할 수 있다. 계면활성제는 또한 생성되는 중합체가 거품을 지지하기에 충분한 분자량을 확립할 때까지 기포에 소정의 치수 안정성을 부여할 수 있다.
- <32> 본 발명의 계면활성제는 비실리콘계이다. 본 발명의 계면활성제는 옥시에틸렌 단위 약 10 내지 약 90중량%와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위 약 10 내지 약 90중량%를 갖는 폴리에테르이다. 이러한 중량%의 계산은 개시제의 중량은 무시한 것이다. 바람직하게는, 계면활성제 중의 기타 옥시알킬렌 단위에 대한 옥시에틸렌의 중량비는 약 1:4 내지 약 4:1이다. 보다 바람직하게는, 계면활성제 중의 기타 옥시알킬렌 단위에 대한 옥시에틸렌 단위의 중량비는 약 1:3 내지 약 3:1이다. 보다 더 바람직하게는, 계면활성제 중의 기타 옥시알킬렌 단위에 대한 옥시에틸렌 단위의 중량비는 약 1:2 내지 약 2:1이다. 가장 바람직하게는, 계면활성제 중의 기타 옥시알킬렌 단위에 대한 옥시에틸렌 단위의 중량비는 약 1.5:2.0 내지 2.0:1.5이다.
- <33> 본 발명의 폴리에테르 계면활성제는 실질적으로 옥시프로필렌 단위를 함유하지 않는다. 본 발명의 폴리에테르 계면활성제의 주쇄에 옥시프로필렌 단위를 포함시키면 계면활성제 특성을 실질적으로 저하시킬 수 있다. 바람직하게는, 본 발명의 폴리에테르 계면활성제는 10중량% 미만의 옥시프로필렌 단위, 보다 바람직하게는 5중량% 미만의 옥시프로필렌 단위, 보다 더 바람직하게는 1중량% 미만의 옥시프로필렌 단위, 가장 바람직하게는 0중량%의 옥시프로필렌 단위를 포함한다.
- <34> 본 발명의 비실리콘 폴리에테르 계면활성제는 분자량이 약 750 내지 약 11,000이다. 바람직하게는, 이의 분자량은 약 1,000 내지 약 8,000, 보다 바람직하게는 약 2,000 내지 약 7,000이다. 비실리콘 계면활성제는 공칭 관능가가 약 1 내지 약 8, 바람직하게는 약 2 내지 약 4, 가장 바람직하게는 약 2 내지 약 3이다.
- <35> 본 발명의 비실리콘 계면활성제는 에틸렌 옥사이드와 탄소수 4 이상의 하나 이상의 기타 알킬렌 옥사이드로 제조된다. 기타 알킬렌 옥사이드는 탄소수가 바람직하게는 4 내지 약 8, 보다 바람직하게는 4 내지 약 6이다. 가장 바람직하게는, 본 발명의 비실리콘 계면활성제를 제조하는 데 사용된 기타 알킬렌 옥사이드는 부틸렌 옥사이드이다.
- <36> 본 발명의 비실리콘 계면활성제를 제조하는 방법은 수개가 존재한다. 한가지 양태에서, 본 발명의 계면활성제는 염기성 촉매의 존재하에 프로필렌 글리콜 개시제와 부틸렌 옥사이드를 혼합함으로써 먼저 폴리부틸렌 옥사이드 폴리에테르를 형성시킨다. 에틸렌 옥사이드/부틸렌 옥사이드 블록 폴리에테르를 형성시키기 위해 염기성 촉매의 존재하에 폴리부틸렌 옥사이드를 에틸렌 옥사이드와 혼합하여 블록 중합체를 제조할 수 있다. 또 다른 양태에서, 본 발명의 계면활성제는 먼저 염기성 촉매의 존재하에 폴리에틸렌 옥사이드 폴리에테르를 형성시킨 다음, 폴리에틸렌 옥사이드에 부틸렌 옥사이드를 혼합하여 블록 중합체를 형성시킴으로써 제조할 수 있다. 블록 중합체는 비교적 저분자량의 폴리에테르를 형성하는 데 유용하지만, 분자량이 약 2,000 이상인 폴리에테르를 형성하기 위해 소정량을 도입하는 것이 바람직할 수 있다. 예를 들면, 또 다른 양태에서, 본 발명의 계면활성제는 먼저 위에서 기재한 바와 같이 폴리부틸렌 옥사이드를 형성시킨 다음, 염기성 촉매의 존재하에 폴리부틸렌 옥사이드를 에틸렌 옥사이드 및 부틸렌 옥

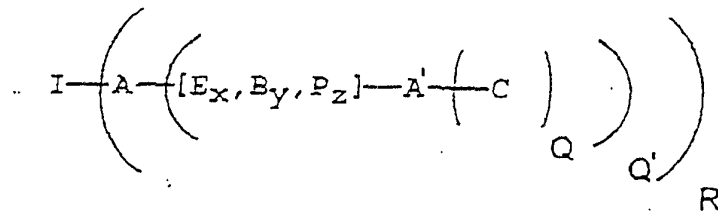
사이드의 혼합 공급물과 혼합함으로써 제조할 수 있다.

<37> 본 발명의 비실리콘 계면활성제는 공칭 관능가가 약 1 내지 약 8일 수 있다. 본 발명의 계면활성제는 폴리에테르를 제조하는 데 유용한 것으로 공지되어 있는 방법으로 제조할 수 있지만, 이는 통상 염기성 촉매의 존재하에 개시제를 알킬렌 옥사이드와 혼합함으로써 제조한다. 개시제의 선택은 수득된 계면활성제의 공칭 관능가를 결정하는 데 있어서 중요하다. 예를 들면, 공칭 관능가가 1인 계면활성제를 제조하기 위해 개시제로서 메탄올을 사용할 수 있다. 공칭 관능가가 8 정도로 큰 계면활성제를 제조하기 위해 슈크로스를 사용할 수 있다. 개시제들의 혼합물도 사용할 수 있다.

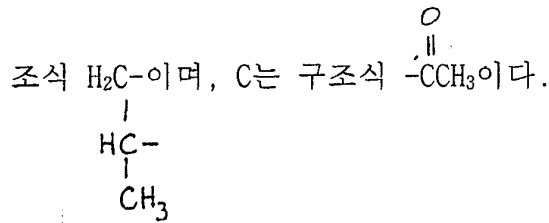
<38> 개시제를 주의깊게 선택함으로써 특수한 특성을 본 발명의 비실리콘 계면활성제에 부여할 수 있다. 예를 들면, 에틸렌 디아민을 개시제로서 사용할 수 있다. 또한, 촉매적 특성을 갖는 계면활성제를 제조하기 위해 촉매 그룹들을 포함하는 기타 개시제들도 사용할 수 있다. 본 발명에서 유용한 개시제는, 알칸올 아민, 알콜, 아민 등과 같은, 폴리에테르 폴리올을 제조하는 데 일반적으로 사용되는 것들을 포함한다. 이러한 개시제는 2-아미노에탄올, 에틸렌 글리콜, 프로필렌 글리콜, 1,3-디하이드록시프로판, 1,4-디하이드록시부탄, 1,6-디하이드록시 헥산, 글리세롤, 1,2,4-트리하이드록시부탄, 1,2,6-트리하이드록시헥산, 1,1,1-트리메틸올에탄, 1,1,1-트리메틸올프로판, 펜타에리트리톨, 폴리카프로락톤, 크실리톨, 아라비톨, 소르비톨, 만니톨, 에틸렌 디아민, 글리세린, 암모니아, 1,2,3,4-테트라하이드록시부탄, 프락토오스, 슈크로오스 등을 포함하지만, 이에 제한되지는 않는다.

<39> 본 발명의 계면활성제는 1 이상의 하이드록시 또는 아민 관능가일 수 있다. 이들은 자체로 초기 중합체 속에 혼입될 수 있거나 아민 또는 하이드록시 반응성 물질로 캡핑될 수 있다. 예를 들면, 본 발명의 계면활성제는 계면활성제를 화학양론적 과량의 폴리이소시아네이트와 반응시킴으로써 이소시아네이트 말단 초기중합체 속에 혼입시킬 수 있다. 유사하게는, 이들은, 예를 들면, 저분자량의 할로-알칸, 유기산 수소화물 등으로 캡핑시킬 수 있다. 바람직하게는, 캡핑 물질은 폴리이소시아네이트 반응성 그룹을 포함하지 않는다. 폴리이소시아네이트에 대하여 비반응성인 계면활성제를 생성하는 화합물로 캡핑시키면, 계면활성제와 폴리이소시아네이트와의 혼합이 바람직할 때에 반응을 일으키지 않고, 계면활성제와 폴리이소시아네이트를 혼합하는 것이 가능하다. 캡핑 화합물이 비실리콘 폴리에테르 계면활성제의 아민 또는 하이드록시 그룹과 반응하기에 충분한 반응 조건하에서 캡핑 화합물과 비실리콘 계면활성제를 혼합함으로써 캡핑은 달성된다.

<40> 본 발명의 캡핑된 폴리에테르 계면활성제는 다음 일반식을 갖는다.



- <41>
- <42> 상기식에서,
- <43> I는 개시제의 비알콕시 반응성 부분이고,
- <44> A 및 A'는 독립적으로 O, N 또는 NH이며,
- <45> E는 옥시에틸렌 그룹이고,
- <46> B는 옥시부틸렌 그룹이며,
- <47> P는 옥시프로필렌 그룹이고,
- <48> x 및 y는 x:y의 비가 1:4 내지 4:1로 되도록 하는 값이며,
- <49> z는 옥시프로필렌 단위의 총 중량이 옥시에틸렌 단위와 옥시부틸렌 단위의 총 중량의 10% 미만으로 되도록 하는 값이고,
- <50> R은 개시제의 관능가에 따라 1 내지 8이며,
- <51> Q 및 Q'는 독립적으로 A 또는 A'가 O 또는 NH인 경우에는 1이고, A 또는 A'가 N인 경우에는 2이며,
- <52> 화합물의 총 분자량은 750 내지 11,000이고,
- <53> C는 캡핑 화합물의 잔기이며,
- <54> E 및 B는 실질적으로 블록으로 존재한다.
- <55> 예를 들면, 프로필렌 글리콜 개시제, 1:1 비의 옥시에틸렌 및 옥시부틸렌을 사용하여 폴리에테르를 제조하고, 아세트산 무수물로 캡핑시키는 경우, A 및 A'는 O이고, x 및 y는 1:1의 비이며, z는 0이고, Q 및 Q'는 1이며, R은 2이고, I는 구



&lt;56&gt;

&lt;57&gt;

본 발명의 한 가지 양태는 폴리이소시아네이트를 다관능성 활성 수소 함유 물질과 반응시켜 수득한 중합체이다. 폴리이소시아네이트 성분은 유리하게는 유기 폴리이소시아네이트, 개질된 폴리이소시아네이트, 이소시아네이트계 초기중합체 및 이들의 혼합물로부터 선택된다. 이들은 지방족 및 지환족 이소시아네이트를 포함할 수 있지만, 방향족, 특히 다관능성 방향족 이소시아네이트가 바람직하다. 2,4- 및 2,6-톨루엔디이소시아네이트 및 상응하는 이성체 혼합물, 4,4'-, 2,4'- 및 2,2'-디페닐메탄디이소시아네이트 및 상응하는 이성체 혼합물, 4,4'-, 2,4'- 및 2,2'-디페닐메탄 디이소시아네이트 및 폴리페닐 폴리메틸렌 폴리이소시아네이트 PMDI, 및 PMDI와 톨루엔 디이소시아네이트의 혼합물이 바람직하다. 1,6-헥사메틸렌 디이소시아네이트; 1-이소시아네이트-3,5,5,-트리메틸-1-3-이소시아네이트메틸-사이클로헥산; 2,4- 및 2,6-헥사하이드로톨루엔디이소시아네이트 및 또한 상응하는 이성체 혼합물; 4,4'-, 2,2'- 및 2,4'-디사이클로헥실메탄디이소시아네이트 및 또한 상응하는 이성체 혼합물과 같은 지방족 및 지환족 이소시아네이트 화합물도 본 발명의 중합체를 제조하는 데 유용하다.

&lt;58&gt;

또한, 소위 개질된 다관능성 이소시아네이트, 즉 상기 디이소시아네이트 및/또는 폴리이소시아네이트의 화학 반응을 통해 수득된 생성물도 폴리이소시아네이트 성분에 유리하게 사용된다. 예를 들면, 에스테르, 우레아, 뉴렛, 알로파네이트 및 바람직하게는 카보디이미드 및/또는 우레톤이민을 포함하는 폴리이소시아네이트, 이소시아누레이드 및/또는 우레탄 그룹 함유 디이소시아네이트 또는 폴리이소시아네이트이다. 이소시아네이트 그룹(NCO) 함량이 10 내지 40중량%, 보다 바람직하게는 10 내지 35중량%인, 카보디이미드 그룹, 우레톤이민 그룹 및/또는 이소시아누레이드 환을 포함하는 액체 폴리이소시아네이트도 사용할 수 있다. 이들은, 예를 들면, 4,4'-, 2,4'- 및/또는 2,2'-디페닐메탄디이소시아네이트 및 상응하는 이성체 혼합물, 2,4- 및/또는 2,6-톨루엔디이소시아네이트 및 상응하는 이성체 혼합물, 4,4'-, 2,4'- 및 2,2'-디페닐메탄디이소시아네이트 및 상응하는 이성체 혼합물, 디페닐메탄 디이소시아네이트 및 PMDI의 혼합물 및 톨루엔디이소시아네이트와 PMDI 및/또는 디페닐메탄 디이소시아네이트의 혼합물을 기본으로 하는 폴리이소시아네이트를 포함한다.

&lt;59&gt;

또한, NCO 함량이 5 내지 40중량%, 보다 바람직하게는 15 내지 30중량%인 초기중합체도 적합하다. 이들 초기중합체는 폴리이소시아네이트를 저분자량의 디올, 트리올을 포함하는 물질과 반응시킴으로써 제조하지만, 이들은 또한 디- 및 트리아민 및 디- 및 트리티올과 같은 다가 활성 수소 화합물을 사용하여 제조할 수 있다. 개개의 예는 NCO 함량이 약 5 내지 약 40중량%, 보다 바람직하게는 약 20 내지 35중량%인, 우레탄 그룹을 포함하는 방향족 폴리이소시아네이트이고, 이들은 디이소시아네이트 및/또는 폴리이소시아네이트를, 예를 들면, 분자량이 약 800 이하인 저분자량의 디올, 트리올, 옥시알킬렌 글리콜, 디옥시알킬렌 글리콜 또는 폴리옥시알킬렌 글리콜과 반응시킴으로써 수득한다. 이러한 폴리올은 개별적으로 또는 디- 및/또는 폴리옥시알킬렌 글리콜과 혼합하여 사용할 수 있다. 예를 들면, 디메틸렌 글리콜, 디프로필렌 글리콜, 폴리옥시메틸렌 글리콜, 폴리옥시프로필렌 글리콜 및 폴리옥시프로필렌폴리옥시메틸렌 글리콜을 사용할 수 있다.

&lt;60&gt;

본 발명에 특히 유용한 것은 NCO 함량이 8 내지 40중량%이고, 카보디이미드 그룹 및/또는 우레탄 그룹을 포함하며, 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트 또는 4,4'- 및 2,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트의 혼합물로부터 수득되는 폴리이소시아네이트(i), 초기중합체의 중량을 기준으로 NCO 함량이 20 내지 35중량%이고 NCO 그룹을 포함하는 초기중합체로서, 관능가가 바람직하게는 2 내지 4이고 분자량이 약 800 내지 약 15,000인 폴리알킬렌 폴리올을 4,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트 또는 4,4'- 및 2,4'-디페닐메탄 디이소시아네이트의 혼합물과 반응시켜 제조한 초기중합체(ii) 및 (i)과 (ii)의 혼합물, 및 2,4- 및 2,6-톨루엔-디이소시아네이트 및 상응하는 이성체 혼합물(iii)이다. 어떠한 형태의 PMDI도 사용할 수 있으며, 따라서 바람직하다. 이러한 경우, 당량은 약 125 내지 약 300, 보다 바람직하게는 약 130 내지 약 175이며, 평균 관능가는 약 2 이상이다. 보다 바람직하게는, 평균 관능가는 약 2.0 내지 약 3.5이다. 폴리이소시아네이트 성분의 정도는 바람직하게는 25°C에서 약 25 내지 약 5,000센티포이즈(cps)(0.025 내지 약 5Pa.s)이지만, 가공의 용이성을 위해서는 약 100 내지 약 1,000cps(0.1 내지 1Pa.s)인 것이 바람직하다. 또 다른 폴리이소시아네이트 성분을 선택하는 경우에도 동일한 정도가 바람직하다.

&lt;61&gt;

본 발명의 중합체를 제조함에 있어서, "A" 성분(폴리이소시아네이트를 포함함)을 "B" 성분(활성 수소 함유 화합물)과 혼합한다. "B" 성분의 활성 수소 함유 화합물은, A 성분이 초기중합체인 경우, "A" 성분의 초기중합체를 제조하는데 사용된 것과 동일하거나 상이할 수 있다. 가장 일반적으로 사용되는 활성 수소 함유 화합물은 2개 이상의 하이드록실 그룹을 갖는 화합물이다. 이러한 화합물은 본 명세서에서 폴리올이라고 한다. 적합한 폴리올의 대표적인 예는 일반적으로 공지되어 있으며, 문헌[참조: High Polymers, Vol. XVI, "Polyurethanes, Chemistry and Technology" by Saunders and Frisch, Interscience Publishers, New York, Vol. I, pp. 32-42, 44-54(1962) and Vol. II, pp. 5-6, 198-199(1964); Organic Polymer Chemistry by K. J. Saunders, Chapman and Hall, London, pp. 323-325(1973); and Developments in Polyurethanes, Vol. I, J. M. Burst, ed., Applied Science Publishers, pp. 1-76(1978)]에 기재되어 있다. 그러나, 본 발명의 방법에서는 특정한 활성 수소 함유 화합물을 사용할 수 있다. 이러한 물질의 예는 다음과 같은 부류의 조성물 단독 또는 혼합물로부터 선택된 것들을 포함한다: 폴리하이드록시알칸의 알킬렌 옥사이드 부가물(a), 비환원 당 및 당 유도체의 알킬렌 옥사이드 부가물(b), 아인산 및 폴리아인산의 알킬렌 옥사이드 부가물(c) 및 폴리페놀의 알킬렌 옥사이드 부가물(d) 이러한 유형의 폴리올은 본 명세서에서 "기본 폴리올"이라고 한다. 본 발명에 유용한 폴리하이드록시알칸의 알킬렌 옥사이드 부가물

의 예는 에틸렌 글리콜, 프로필렌 글리콜, 1,3-디하이드록시프로판, 1,4-디하이드록시부탄, 및 1,6-디하이드록시헥산, 글리세롤, 1,2,4-트리하이드록시부탄, 1,2,6-트리하이드록시헥산, 1,1,1-트리메틸올에탄, 1,1,1-트리메틸올프로판, 펜타에리트리톨, 폴리카프로락톤, 크실리톨, 아라비톨, 소르비톨, 만니톨 등이다. 폴리하이드록시알칸의 알킬렌 옥사이드 부가물로서 본 발명에서 바람직한 것은 트리하이드록시알칸의 에틸렌 옥사이드 부가물이다. 기타 유용한 부가물은 에틸렌 디아민, 글리세린, 암모니아, 1,2,3,4-테트라하이드록시부탄, 프락토오스 및 슈크로오스를 포함한다.

- <62> 또한, 폴리(옥시프로필렌)글리콜, 트리올, 테트롤 및 헥솔 및 에틸렌 옥사이드로 캄핑된 이들 중의 하나도 바람직하다. 이러한 폴리올은 또한 폴리(옥시프로필렌옥시에틸렌)폴리올을 포함한다. 옥시에틸렌 함량은 총 중량의 바람직하게는 약 80중량% 미만, 보다 바람직하게는 약 40중량% 미만을 차지해야 한다. 에틸렌 옥사이드가 사용되는 경우, 이들은 중합체 쇄를 따라 특정한 방법으로 혼입시킬 수 있고, 예를 들면, 내부 블록, 말단 블록 또는 임의로 분포된 블록 또는 이들의 특정 혼합물로서 혼입시킬 수 있다.
- <63> 본 발명에서는 폴리아민, 방향족 폴리에스테르 폴리올, 지방족 폴리에스테르 폴리올, 아민 말단 폴리올, 폴리머캡탄 및 기타 이소시아네이트 반응성 화합물도 적합하다. 폴리이소시아네이트 중부가 활성 수소 함유 화합물(PIPA)은 본 발명에서의 사용에 특히 바람직하다. PIPA 화합물은 통상 TDI와 트리메탄올 아민의 반응 생성물이다. PIPA 화합물을 제조하는 방법은, 예를 들면, 로울랜드스(Rowlands)에게 허여된 미합중국 특허 제4,374,209호에 기재되어 있다.
- <64> 또 다른 바람직한 부류의 폴리올은 "공중합체 폴리올"이고, 이들은 기본 폴리올을 함유하는 안정하게 분산된 중합체[예: 아크릴로니트릴-스티렌 공중합체]이다. 이들 공중합체 폴리올은 다양한 재료, 예를 들면, 촉매[예: 아조비스이소부티로니트릴], 공중합체 폴리올 안정화제 및 연쇄 이동제[예: 이소프로판올]를 포함하는 반응 혼합물로부터 제조할 수 있다.
- <65> 본 발명의 중합체 발포제는 발포제를 사용하여 제조한다. 본 발명의 폴리이소시아네이트는 발포제의 존재하에 활성 수소 화합물과 반응시키는 것이 유리하다. 특정한 발포제 또는 이들의 혼합물이 본 발명을 실시하는 데 사용하기에 적합하다. 적합한 발포제는 무기 발포제[예: 물], 반응 온도에서 휘발성인 유기 발포제 및 용해되어 있는 불활성 기체를 포함한다. 적합한 유기 발포제는 아세톤, 에틸 아세테이트, 만니톨, 에탄올, 할로겐 치환된 알칸[예: 메틸렌 클로라이드, 클로로포름, 에틸리엔 클로라이드, 트리클로로플루오로에탄, 1,1-디클로로-1-플루오로에탄, 1,1,1,2-테트라플루오로에탄, 클로로-디플루오로에탄, 디클로로디플루오로에탄 등], 부탄, 펜탄, 헥산, 헵탄, 디에틸 에테르 등을 포함한다. 출발 성분에 불활성인 기체[예: 질소, 공기, 이산화탄소 등]도 유용한 발포제이다. 적합한 온도에서 분해되어 질소와 같은 기체를 생성하는 아지드와 같은 화합물도 유용하다. 바람직한 발포제는 -50 내지 100°C, 보다 바람직하게는 약 -40 내지 50°C에서 비등하는 화합물이다.
- <66> 사용된 발포제의 양은 본 발명에 중요하지는 않지만, 반응 혼합물을 발포시키기에 충분한 양인 것이 바람직하다. 이러한 양은 발포된 생성물에서 바람직한 밀도와 같은 인자에 따라 변하게 된다.
- <67> 물은 본 발명을 실시하는 데 사용하기에 유용한 발포제이다. 발포를 위해 이산화탄소 기체를 발생시키는 이외에, 물은 폴리이소시아네이트 성분과 신속하게 반응하여 기체 보유를 위해 요구되는 초기중합체 강도에 기여한다. 일반적으로, 물을 사용하는 경우에는, 활성 수소 함유 조성물, 즉 B 성분의 총 중량을 기준으로 하여, 약 0.4 내지 약 8중량%의 비율로 물이 존재한다. 기타 발포제는 물과 혼합하여 사용할 수 있다.
- <68> 본 발명은 폴리우레탄, 폴리이소시아누레이트 및 폴리우레아와 같은 중합체를 포함한다. 폴리우레아 제형은 종종 자체 촉매성일 수 있다. 폴리우레탄 및 폴리이소시아누레이트 발포제 제형은 대개 촉매를 포함한다. 폴리우레탄 촉매는 본 발명에서 적합하게 사용된다. 이러한 촉매는 본 발명의 조성물의 이소시아네이트 그룹과 하이드록실 반응 중의 반응 속도를 증가시키기에 적합한 양으로 제형 속에 혼입시키는 것이 바람직하다. 이러한 목적에 광범위한 물질이 유용한 것으로 공지되어 있지만, 가장 널리 사용되고 또한 바람직한 촉매는 3급 아민 촉매 및 유기 주석 촉매이다.
- <69> 3급 아민 촉매의 예는 트리에틸렌디아민, 펜타메틸디에틸렌트리아민, N-메틸모르폴린, N-에틸모르폴린, 디에틸에탄올아민, N,N-디메틸사이클로헥실아민, 디에틸에탄올아민, N-코코모르폴린, 1-메틸-4-디메틸아미노에틸피페라진, 3-메톡시-N-디메틸프로필아민, N,N-디에틸-3-디에틸아미노프로필아민, 디메틸벤질아민등을 포함한다. 3급 아민 촉매는 폴리올 제형 중량의 약 0.01 내지 약 5중량%의 양으로 사용하는 것이 유리하다.
- <70> 유기 주석 촉매의 예는 디메틸주석 디라우레이트, 디부틸주석 디라우레이트, 디옥틸주석 디라우레이트, 옥탄산 제1주석 등을 포함한다. 유효한 기타 촉매의 예는, 예를 들면, 미합중국 특허 제 2,846,408호에 교시되어 있다. 바람직하게는, 유기 주석 촉매는 폴리올 제형 중량의 약 0.001 내지 약 0.5중량%의 양으로 사용한다.
- <71> 본 발명에서 사용하기에 적합한 촉매는 문헌[참조: Saunders and Frisch, Polyurethanes, Chemistry and Technology in 1 High Polymers Vol. XVI, pp94-97(1962)]에 기재된 것들과 같은 이소시아누레이트의 형성을 촉매하는 것들을 포함한다. 이러한 촉매는 본 명세서에서 삼량체화 촉매라고 한다. 이들 촉매의 예는 지방족 및 방향족 3급 아민 화합물, 유기금속 화합물, 카복실산의 알칼리 금속염, 페놀 및 대칭 테트라진 유도체를 포함한다. 바람직한 촉매는 카복실산의 칼륨염[예: 옥탄산칼륨] 및 2-에틸헥산산의 칼륨염 및 3급 아민[예: 2,4,6-트리스(디메틸아미노메틸)페놀]이다.
- <72> 충전제 및 첨가제도 본 발명에서의 사용에 또한 적합하다. 충전제는 일반적으로 보다 고가의 유기 성분을 대체하고, 때때로 특정한 물리적 특성을 개량시키는 데 사용될 수 있는 무기 물질이다. 예를 들면, 절단된 유리, 유리섬유, 카울린 등을 본 발명의 제형에 포함시킬 수 있다. 첨가제는 일반적으로 일부의 특정한 특성을 부여하기 위해 중합체 제형에 첨가되는 물질이다. 예를 들면, 전도성 유도제, 난연제, 안료 등을 모두 본 발명의 제형에 포함시킬 수 있다. 중합체 발포제를 제조하는 데 유용한 것으로 당해 분야의 숙련자에게 공지되어 있는 특정한 충전제 또는 첨가제가 본 발명에서 사용될 수 있다.

<73> 본 발명의 계면활성제는 폴리우레탄 중합체를 제조하는 데 사용할 수 있다. 2성분(A 및 B)의 폴리우레탄 중합체 제형에서, 캡핑되지 않은 비실리콘 계면활성제는 일반적으로 안정한 B 측에 포함될 수 있다. 또는, 본 발명의 캡핑되지 않은 비실리콘 계면활성제는 초기중합체를 형성시키기 위해 사용될 수 있는 A 측에 포함시킬 수 있다. 본 발명의 캡핑된 계면활성제는 A 측 또는 B 측에 포함시킬 수 있다. 경우에 따라, 활성 수소 반응성 그룹 함유 캡핑 화합물은 B 측의 초기중합체를 형성하는 데 유용한 계면활성제를 제조하기 위해 사용할 수 있다. 3성분 폴리우레탄 제형에 있어서, 제3 성분 또는 "C" 성분은 촉매이며, 본 발명의 비실리콘 계면활성제의 모두 또는 일부가 그 측에 포함될 수도 있다.

<74> 본 발명의 계면활성제는 발포체 안정화 및 반응 혼합물의 상용화의 목적하는 작용을 발휘하기에 적합한 농도로 폴리우레탄 제형에 포함된다. 폴리우레탄 제형 성분의 중량비의 광범위한 변화로 인하여, 제형의 B 측에서 폴리올 100부당 계면활성제의 부로서 계면활성제 충전량을 특징하는 것이 폴리우레탄의 제조 분야에서 일반적이다. 본 발명의 목적을 위하여, 폴리우레탄 제형 중의 본 발명의 비실리콘 계면활성제의 농도는 계면활성제를 포함하지 않는 B 측에 포함되는 활성 수소 함유 화합물 100부당 계면활성제의 부로서 측정한다. 바람직하게는, 본 발명의 비실리콘 계면활성제는, 활성 수소 함유 화합물 100부당, 약 0.25 내지 약 20부, 보다 바람직하게는 약 0.5 내지 약 10부, 보다 더 바람직하게는 약 1 내지 약 5부의 반응 혼합물 농도로 존재한다.

<75> 하기 실시예는 본 발명을 설명하기 위해 제공한다. 이러한 실시예는 본 발명의 범위를 한정하려는 것은 아니며, 본 발명을 이로써 한정하려는 것으로 해석하여서도 안된다. 양은, 달리 나타내지 않는 한, 중량부 또는 중량%이다.

### 실시예

<76> 실시예 1

<77> 약 6% KOH를 함유하는 1,2-프로필렌 글리콜 656g을 밀폐계 반응 용기 속에 충전시킴으로써 비실리콘 폴리에테르 계면활성제를 제조한다. 반응기를 밀봉하고, 130°C로 가열한다. 70psi(482.6kPa)를 초과하지 않도록 하기에 충분한 속도로 후속적인 압력 저하가 0.5psi(3.4kPa)/hr 미만으로 될 때까지 1,2-부틸렌 옥사이드 5645g을 반응기 속에 공급한다. 이러한 중간체 물질 3767g을 반응기에서 제거시킨다. 이어서, 에틸렌 옥사이드 597g을 반응기 속에 공급한다. 압력 저하가 안정화된 후, 폴리에테르 계면활성제를 분석한다. 수득된 폴리에테르 계면활성제는 분자량이 약 902이고, 옥시부틸렌 그룹(이후에는, B0라고 함)이 72.5 중량%이고, 옥시에틸렌 그룹(이후에는, E0라고 함)이 19.1중량%이며, 공칭 관능가가 2이다.

<78> 하기 표 1에 기재된 제형을 혼합함으로써 중합체 발포체를 제조하고, 이는 먼저 플라스틱 컵 속에서 폴리올, 촉매, 계면활성제 및 발포제를 완전히 혼합한 것이다. 이어서, PMDI를 컵에 가하고, 드릴 프레스(drill press)에 부착된 4in(10.2cm) 임펠러를 이용하여 혼합물을 1,500rpm으로 교반한다. 중합 혼합물을 14in x 14in x 14in(35.6cm x 35.6cm x 35.6cm)의 박스 금형에 붓고 상승(발포)시킨다. 중합체 발포체의 물리적 특성 및 반응 프로파일을 측정하여 하기 표 2에 나타내었다.

<79> 실시예 2

<80> 분자량이 1,836이고 B0가 53.2중량%이며 E0가 42.6중량%이고 공칭 관능가가 2인 폴리에테르 계면활성제를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 중합체 발포체의 물리적 특성과 반응 프로파일을 측정하여 하기 표 2에 나타내었다.

<81> 실시예 3

<82> 트리에틸렌글리콜 모노메틸 에테르에 의해 개시되고, 분자량이 1,428이고 B0가 44.6중량%이며 E0가 50.0중량%이고 공칭 관능가가 2인 폴리에테르 계면활성제를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 중합체 발포체의 물리적 특성과 반응 프로파일을 측정하여 하기 표 2에 나타내었다.

<83> 비교실시예 4

<84> 종래의 실리콘계 계면활성제를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 중합체 발포체의 물리적 특성과 반응 프로파일을 측정하여 하기 표 2에 나타내었다.

<85> [표 1]

<86> 농도(중량부)

&lt;87&gt;

실시에 번호	1	2	3	비교실시에 4*
폴리올 <sup>1</sup>	100.0	100.0	100.0	100.0
계면활성제 A	1.5	--	--	--
계면활성제 B	--	1.5	--	--
계면활성제 C	--	--	1.5	--
종래의 실리콘 계면활성제 <sup>2</sup>	--	--	--	1.5
우레탄 촉매 <sup>3</sup>	0.23	0.23	0.23	0.23
이소시아누레이트 촉매 <sup>4</sup>	1.8	1.8	1.8	1.8
발포제 <sup>5</sup>	40.6	40.6	40.6	40.6
폴리이소시아네이트 <sup>6</sup>	158.9	158.9	158.9	158.9

&lt;88&gt; \* 본 발명의 실시예가 아님

<89> 1. 하이드록실가가 250인 방향족 폴리에스테르 폴리올로서 STEPANPOL PS-2502<sup>\*\*</sup> [<sup>\*\*</sup> STEPANPOL PS-2502는 스텐 캄파니(Stapan Company)의 상표명이다].

&lt;90&gt; 2. 오가노실록산-폴리에테르 공중합체 계면활성제.

&lt;91&gt; 3. POLYCAT 8은 N,N-디메틸사이클로헥실아민 촉매이고, 에어 프로덕츠 앤드 케미칼즈 인코포레이티드(Air Products and Chemicals, Inc.)의 상표명이다.

&lt;92&gt; 4. HEXCEM 977은 디에틸렌 글리콜 중의 2-에틸헥산산의 칼륨염이고, 오엠 그룹 인코포레이티드(OM Group, Inc.)의 상표명이다.

&lt;93&gt; 5. CFC-11은 트리클로로플루오로메탄 발포제이다.

<94> 6. 점도가 700cps(0.7NS/m<sup>3</sup>)이고 이소시아네이트 당량이 약 139인 PMDI.

&lt;95&gt; [표 2]

&lt;96&gt;

실시에 번호	1	2	3	비교실시에 4*
반응 프로파일 <sup>1</sup>				
크림 시간	20	22	20	23
겔화 시간	44	45	45	55
상승 시간	71	76	60	73
코어 밀도 <sup>2</sup> pcf/(kg/m <sup>3</sup> )	1.49/23.9	1.44/23.0	1.56/25.0	1.52/24.3
K-인자 <sup>3</sup>	0.129	0.124	0.122	0.128
압축 강도 <sup>4</sup> (psi/kPa)				
상승에 대하여 평행	27.6/190.3	24.3/167.5	31.0/213.7	34.4/237.2
상승에 대하여 수직(1)	14.2/97.9	14.0/96.5	16.8/115.8	16.4/113.1
상승에 대하여 수직(2)	14.8/102.0	14.1/97.2	16.5/113.8	15.0/103.4

&lt;97&gt; \* 본 발명의 실시예가 아님

&lt;98&gt; 1. 반응성 프로파일은 폴리이소시아네이트 또는 이와 활성 수소 화합물과의 혼합물의 혼합으로부터 폴리우레탄 또는 폴리이소시아누레이트 발포체를 형성할 때의 특정한 현상이 관찰될 때까지의 시간을 측정함으로써 결정할 수 있다. 발포 형성능의 측정은 다음을 포함한다.



- <99> a) 크림 시간: 혼합으로부터 발포가 개시될 때까지의 시간(초)으로서, 기체가 혼합물을 먼저 발포하기 시작하는 시간을 관찰함으로써 측정한다.
- <100> b) 겔화 시간: 혼합으로부터, 발포 혼합물 중에 나무 막대를 삽입하고, 발포 혼합물로부터 제거한 나무 막대에 발포 혼합물이 "스트링(string)"을 생성하기 시작할 때까지의 시간(초).
- <101> c) 상승 시간: 혼합으로부터 기포가 상승하지 않을 때까지의 시간(초).
- <102> d) 무점착성 시간: 혼합으로부터 기포 표면이 이의 점착성을 상실할 때까지의 시간(초).
- <103> 2. ASTM-D-1622-88.
- <104> 3. ASTM-C-518-85.
- <105> 4. ASTM-D-1621-73

<106> 실시예 5

- <107> 하기 표 3에 나타난 제형을 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 폴리에테르 계면활성제는 분자량이 약 902이고 B0가 72.5중량%이며 E0가 19.1중량%이고 공칭 관능가가 2이다. 중합체 발포체의 물리적 특성과 반응 프로파일을 측정하여 하기 표 4에 나타내었다.

<108> 실시예 6

- <109> 분자량이 1,836이고 B0가 53.2중량%이며 E0가 42.6중량%이고 공칭 관능가가 2인 폴리에테르 계면활성제를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 5와 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 중합체 발포체의 물리적 특성과 반응 프로파일을 측정하여 하기 표 4에 나타내었다.

<110> 실시예 7

- <111> 트리에틸렌글리콜 모노메틸 에테르에 의해 개시되고, 분자량이 1,428이고 B0가 44.6중량%이며 E0가 50.0중량%이고 공칭 관능가가 2인 폴리에테르 계면활성제를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 5와 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 중합체 발포체의 물리적 특성과 반응 프로파일을 측정하여 하기 표 4에 나타내었다.

<112> 비교실시예 8

- <113> 종래의 실리콘계 계면활성제를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 5와 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 중합체 발포체의 물리적 특성과 반응 프로파일을 측정하여 하기 표 4에 나타내었다.

<114> [표 3]

<115> 농도(중량부)

실시예 번호	5	6	7	비교실시예 8*
폴리올 <sup>1</sup>	100.0	100.0	100.0	100.0
계면활성제 A	2.1	--	--	--
계면활성제 B	--	2.1	--	--
계면활성제 C	--	--	2.1	--
종래의 실리콘계면활성제 <sup>2</sup>	--	--	--	2.1
우레탄 촉매 <sup>3</sup>	0.20	0.20	0.20	0.20
우레탄 촉매 <sup>4</sup>	0.10	0.10	0.10	0.10
이소시아누레이트 촉매 <sup>5</sup>	5.0	5.0	5.0	5.0
물	2.5	2.5	2.5	2.5
발포제 <sup>6</sup>	26.9	26.9	26.9	26.9
폴리이소시아네이트 <sup>7</sup>	265.1	265.1	265.1	265.1

<116>

<117> \* 본 발명의 실시예가 아님

<118> 1. 하이드록실가가 250인 방향족 폴리에스테르 폴리올로서 STEPANPOL PS-2502\*\* [\*\* STEPANPOL PS-2502는 스테판 캄파니의 상표명이다].

- <119> 2. 오가노실록산-폴리에테르 공중합체 계면활성제.
- <120> 3. POLYCAT 8은 N,N-디메틸사이클로헥실아민 촉매이고, 에어 프로덕츠 앤드 케미칼즈 인코포레이티드의 상표명이다.
- <121> 4. POLYCAT 5는 펜타메틸디에틸렌트리아민 촉매이고, 에어 프로덕츠 앤드 케미칼즈 인코포레이티드의 상표명이다.
- <122> 5. HEXCEM 977은 디에틸렌 글리콜 중의 2-에틸헥산산의 칼륨염이고, 오엠 그룹 인코포레이티드의 상표명이다.
- <123> 6. CFC-11은 트리클로로플루오로메탄 발포제이다.
- <124> 7. 점도가 700cps(0.7NS/m<sup>3</sup>)이고 이소시아네이트 당량이 약 139인 PMDI.

[표 4]

실시에 번호	5	6	7	비교실시에 8*
반응 프로파일 <sup>5</sup>				
크림 시간	21	21	21	21
겔화 시간	72	64	58	60
상승 시간	94	92	95	90
코어 밀도 <sup>6</sup> pcf/(kg/m <sup>3</sup> )	1.72/27.6	1.66/26.6	1.69/27.1	1.72/27.6
K-인자 <sup>3</sup>	0.149	0.158	0.157	0.155
압축 강도 <sup>4</sup> (psi/kPa)				
상승에 대하여 평행	25.9/178.6	25.1/173.1	26.1/180.0	37.7/259.9
상승에 대하여 수직(1)	16.8/115.8	16.9/116.5	17.1/117.9	17.3/119.3
상승에 대하여 수직(2)	15.8/108.9	15.9/109.6	16.1/111.0	16.2/111.7

- <126>
- <127> \* 본 발명의 실시예가 아님
- <128> 1. 표 2의 주 1 참조
- <129> 2. ASTM-D-1622-88
- <130> 3. ASTM-C-518-85
- <131> 4. ASTM-D-1621-73

## 실시에 9

- <133> 하기 표 5에 나타난 제형을 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 폴리에테르 계면활성제는 메탄올의 EO 부가물(일반식: MeOCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OCH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>OH)에 의해 개시되며, 분자량이 약 1550이고 B0가 33.4중량%이며 EO가 56.1중량%이고 공칭 관능가가 1이다. 중합체 발포체의 물리적 특성과 반응 프로파일을 측정하여 하기 표 6에 나타내었다.

## 비교실시에 10

- <135> 종래의 실리콘 계면활성제만을 사용하는 것을 제외하고는 실시예 9와 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 중합체 발포체의 물리적 특성과 반응 프로파일을 측정하여 하기 표 6에 나타내었다.

[표 5]

농도(중량부)

실시에 번호	9	비교실시에 10*
폴리올 <sup>1</sup>	100.0	100.0
계면활성제 D	1.0	--
종래의 실리콘 계면활성제 <sup>2</sup>	1.0	2.0
우레탄 촉매 <sup>3</sup>	0.60	0.60
이소시아네이트 촉매 <sup>4</sup>	2.3	2.3
물	1.0	1.0
발포제 <sup>5</sup>	32	32
폴리이소시아네이트 <sup>6</sup>	187.5	187.5

&lt;138&gt;

&lt;139&gt;

\* 본 발명의 실시예가 아님

&lt;140&gt;

1. 하이드록실가가 235인 방향족 폴리에스테르 디올로서 STEPANPOL PS-2352<sup>\*\*</sup> (\*\* STEPANPOL PS-2352는 스테판 캄파니의 상표명이다).

&lt;141&gt;

2. 오가노실록산-폴리에테르 공중합체 계면활성제.

&lt;142&gt;

3. POLYCAT 8은 N,N-디메틸사이클로헥실아민 촉매이고, 에어 프로덕츠 앤드 케미칼즈 인코포레이티드의 상표명이다.

&lt;143&gt;

4. HEXCEM 977은 디에틸렌 글리콜 중의 2-에틸헥산산의 칼륨염이고, 오렘 그룹 인코포레이티드의 상표명이다.

&lt;144&gt;

5. HCFC-141b는 1,1-디클로로-1-플루오로에탄 발포제이다.

&lt;145&gt;

6. 점도가 700cps(0.7NS/m<sup>3</sup>)이고 이소시아네이트 당량이 약 139인 PMDI.

&lt;146&gt;

[표 6]

실시에 번호	9	비교실시에 10*
반응 프로파일 <sup>1</sup>		
크림 시간	16	16
젤화 시간	31	32
상승 시간	60	60
코어 밀도 <sup>2</sup> [pcf/(kg/m <sup>3</sup> )]	1.74/27.9	1.77/28.4
K-인자 <sup>3</sup>	0.148	0.149
압축 강도 <sup>4</sup> (psi/kPa)		
상승에 대하여 평행	30.7/211.7	33.0/227.5
상승에 대하여 수직(1)	14.8/102.2	13.9/96.0
상승에 대하여 수직(2)	14.8/102.0	13.8/95.1
연소 시험 <sup>5</sup>		
연기 발생량	665	765
발열량	190	186
중량 손실(%)	33.7	38.3

&lt;147&gt;

<148> \* 본 발명의 실시예가 아님

<149> 1. 표 2의 주 1 참조

<150> 2. ASTM-D-1822-88

<151> 3. ASTM-C-518-85

<152> 4. ASTM-D-1621-73

<153> 5. ASTM-E-906-83

<154> 실시예 11

<155> 하기 표 7에 나타낸 제형을 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 폴리메테르 계면활성제는 프로필렌 글리콜에 의해 개시되고, 분자량이 약 6,800이고 B0가 60.6중량%이며 E0가 38.3중량%이고 공칭 관능가가 2이다. 발포체의 발포체 품질을 육안으로 검사한다. 발포체가 미세한 기포 크기를 갖고 지나치게 약하지 않은 경우에는 발포체 품질 시험에 합격한 것으로서, 이는 하기 표 7에 "+"로 나타내었다.

<156> 실시예 12

<157> 분자량이 약 4,595이고 B0가 78.9중량%이며 E0가 19.6중량%이고 공칭 관능가가 2인 계면활성제를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 11과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 발포체 측정 결과를 하기 표 7에 나타내었다.

<158> 비교실시예 13

<159> 계면활성제가 종래의 실리콘 계면활성제인 것을 제외하고는 실시예 11과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 발포체 측정 결과를 하기 표 7에 나타내었다.

<160> [표 7]

<161> 농도(중량부)

실시예 번호	11	12	비교실시예 13*
폴리올 <sup>1</sup>	100	100	100
계면활성제 E	1.0	--	--
계면활성제 F	--	1.5	--
종래의 실리콘 계면활성제 <sup>2</sup>	--	--	2.0
우레탄 촉매 <sup>3</sup>	2.85	2.85	2.85
이소시아누레이트 촉매 <sup>4</sup>	2.5	2.5	2.5
물	3.7	3.7	3.7
발포제 <sup>5</sup>	21	21	21
폴리이소시아네이트 <sup>6</sup>	176.0	176.0	176.0
발포체 품질 <sup>7</sup>	+	+	+
코어 밀도 <sup>8</sup> pcf/(kg/m <sup>3</sup> )	1.32/21.2	1.32/21.2	1.32/21.2

<162>

<163> \* 본 발명의 실시예가 아님

<164> 1. 관능가가 약 3.90이고 OH 당량이 145.2인 폴리메테르 폴리올.

<165> 2. 오가노실록산-폴리메테르 공중합체 계면활성제.

<166> 3. 3급 아민의 혼합물

<167> 4. CURITHANE 52는 나트륨 글리시네이트 유도체이고, 더 다우 케미칼 캄파니(The Dow Chemical Company)의 상표명이다.

<168> 5. HCFC-141b는 1,1-디클로로-1-플루오로에탄 발포제이다.

<169> 6. 이소시아네이트 당량이 약 134이고 25°C에서의 점도가 약 170이며 관능가가 약 2.7인 폴리이소시아네이트.

<170> 7. 상기한 실시예 11 참조.

<171> 8. ASTM-D-1622-88.

비교실시에 14

<173> 계면활성제를 사용하지 않는 것을 제외하고는 실시예 11과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조한다. 발포체를 발포체 품질에 대해 시험한 결과 불합격으로 나타났다.

비교실시에 15

<175> 에틸렌 옥사이드/프로필렌 옥사이드 폴리에테르 계면활성제를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 11과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조한다. 계면활성제는 분자량이 약 6,600이고 프로필렌 옥사이드가 44.4중량%이며 E0가 52중량%이고 공칭 관능가가 2이다. 발포체를 발포체 품질에 대해 시험한 결과 불합격으로 나타났다.

실시에 16

<177> 다음과 같은 단계의 공정을 사용하는 방법으로 캡핑된 비실리콘 폴리에테르 계면활성제를 제조한다:

<178> 1) 분자량이 약 4,600인 부틸렌 옥사이드 에틸렌 옥사이드, 프로필렌 글리콜 개시된 블록 폴리에테르 계면활성제 1013.2g을 진공 증류 헤드, 열전쌍, 자기 교반 바아, 가열 맨틀(heating mantel) 및 질소 유입관이 장착된 2ℓ 의 5구 환저 플라스크 속에 충전시킨다.

<179> 2) 아세트산 무수물 60g을 환저 플라스크에 충전시킨다.

<180> 3) 폴리에테르 및 아세트산 무수물을 통해 질소를 주변 온도에서 30분간 퍼징 (purging)한다.

<181> 4) 플라스크를 85℃로 30분간 가열한다.

<182> 5) 플라스크 속의 물질을 100℃에서 2.5시간 동안 환류시킨다.

<183> 6) 플라스크를 부분 진공하에 135℃에서 15분간 가열하고, 공비가 일어나지 않도록 질소를 시스템에 도입한다.

<184> 7) 플라스크의 온도를 150℃로 상승시키고 증류가 더 이상 관찰되지 않을 때까지 완전 진공하에 유지시킨다.

<185> 8) 플라스크를 150℃에서 완전 진공하에 추가로 15분간 유지시킨다.

<186> 9) 이어서, 생성물을 90Torr(12kPa)에서 4시간 동안 질소로 퍼징시킨다.

<187> 10) 생성물을 주변 온도로 냉각시킨다. 생성된 물질은 측정가능한 활성 수소를 갖지 않는 투명한 폴리에테르이다.

실시에 17, 실시예 18 및 비교실시에 19

<189> 중합체 발포체를 다음과 같이 제조한다:

<190> 1) 폴리에테르 계면활성제의 분자량이 약 4,600이고 B0가 86중량%이며 E0가 12중량%이고, 부틸렌 옥사이드와 80:20으로 혼합된 에틸렌 옥사이드를 당해 계면활성제의 제조에 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 실질적으로 동일한 방법으로 폴리에테르 계면활성제를 제조한다.

<191> 2) 단계 1의 폴리에테르 계면활성제를 실시예 16과 실질적으로 동일한 방법으로 캡핑시킨다.

<192> 3) 상기 단계 2의 캡핑된 계면활성제 및 표 8에 기재된 제형을 사용하고 계면활성제 및 발포체의 일부분을 먼저 폴리이소시아네이트와 혼합하는 것을 제외하고는 실시예 1과 실질적으로 동일한 방법으로 중합체 발포체를 제조하여 시험한다. 물리적 특성을 기록하여 표 9에 나타내었다.

[표 8]

<194> 농도(중량부)

실시에 번호	17	18	비교실시에 19*
폴리올 <sup>1</sup>	85	85	85
폴리올 <sup>2</sup>	15	15	15
비-Si 계면활성제	2.47	1.23	--
종래의 실리콘 계면활성제 <sup>3</sup>	--	--	2.47
우레탄 촉매 <sup>4</sup>	0.25	0.25	0.25
이소시아누레이트 촉매 <sup>5</sup>	4.0	4.0	4.0
물	1.1	1.1	1.1
발포제 <sup>6</sup>	28.9	28.9	28.9
폴리이소시아네이트 <sup>7</sup>	220.1	220.1	220.1
비-Si 계면활성제**	0.53	0.26	--
종래의 실리콘 계면활성제 3**	--	--	0.53
발포제***	11.0	11.0	11.0

&lt;195&gt;

&lt;196&gt;

&lt;197&gt;

&lt;198&gt;

1. 하이드록실가가 235인 방향족 폴리에스테르 디올로서 STEPANPOL PS-2352<sup>\*\*</sup> (\*\*STEPANPOL PS-2352는 스테판 캄파니의 상표명이다).

&lt;199&gt;

&lt;200&gt;

&lt;201&gt;

2. 마크 --는 불명.  
3. 오가노실록산-폴리에테르 공중합체 계면활성제.

&lt;202&gt;

4. POLYCAT 5는 펜타메틸-디에틸렌 트리아민 촉매이고, 에어 프로덕츠 앤드 케미칼 인코포레이티드의 상표명이다.

&lt;203&gt;

&lt;204&gt;

&lt;205&gt;

5. HEXCEM 977은 디에틸렌 글리콜 중의 2-에틸헥산산의 칼륨염이고, 오엠 그룹 인코포레이티드의 상표명이다.  
6. HCFC-141b는 1,1-디클로로-1-플루오로에탄 발포제이다.  
7. 점도가 700cps(0.7NS/m<sup>3</sup>)이고 이소시아네이트 당량이 약 139인 PMDI.

[표 9]

실시에 번호	17	18	비교실시에 19*
반응 프로파일 <sup>1</sup>			
크림 시간	17	17	17
겔화 시간	32	32	32
상승 시간	41	41	41
코어 밀도 <sup>2</sup> pcf/(kg/m <sup>3</sup> )	1.78/28.5	1.74/27.8	1.76/28.2
K-인자 <sup>3</sup>	0.135	0.135	0.139
압축 강도 <sup>4</sup> (psi/kPa)			
상승에 대하여 평행	34.9/240.6	35.6/245.4	38.1/262.7
상승에 대하여 수직	13.5/93.1	12.9/88.9	13.1/90.3

&lt;206&gt;

&lt;207&gt;

&lt;208&gt;

\* 본 발명의 실시예가 아님

1. 표 2의 주석 1 참조

- <209> 2. ASTM-D-1822-88  
 <210> 3. ASTM-C-518-85  
 <211> 4. ASTM-D-1621-73

### (57) 청구의 범위

#### 청구항 1

다관능성 활성 수소 함유 화합물(A)와 반응 혼합물 농도가 활성 수소 화합물 100부당 0.25 내지 20부인 비실리콘 계면활성제(D)를 포함하는 활성 수소 함유 조성물로서,

비실리콘 계면활성제(D)가 옥시에틸렌 단위 10 내지 90중량%(옥시에틸렌 단위와 옥시알킬렌 단위의 총 중량을 기준으로 함)와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위 10 내지 90중량%(옥시에틸렌 단위와 옥시알킬렌 단위의 총 중량을 기준으로 함)를 갖는 아민 또는 하이드록시 개시된 폴리에테리이고,

비실리콘 계면활성제 (D)가 일반식  $I-(A-([E_x, B_y, P_z]-A')_n-(C)_q)_m R$  [여기서, I는 개시제의 비알콕시 반응성 부분이고, A 및 A'는 독립적으로 O, N 또는 NH이며, E는 옥시에틸렌 그룹이고, B는 옥시부틸렌 그룹이며, P는 옥시프로필렌 그룹이고, x 및 y는 x:y의 비가 1:4 내지 4:1로 되도록 하는 값이며, z는 옥시프로필렌 단위의 총 중량이 옥시에틸렌 단위와 옥시부틸렌 단위의 총 중량의 10% 미만으로 되도록 하는 값이고, R은 개시제의 관능가에 따라 1 내지 8이며, Q 및 Q'는 독립적으로 A 또는 A'가 O 또는 NH인 경우에는 1이고, A 또는 A'가 N인 경우에는 2이며, 화합물의 총 분자량은 750 내지 11,000이고, C는 캡핑 화합물의 잔기이며, E 및 B는 실질적으로 블록으로 존재한다]을 가지며,

단 비실리콘 계면활성제(D)는 알킬페놀-알데하이드 축합 생성물을 기본으로 하는 폴리에테르가 아님을 특징으로 하는, 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 2

제1항에 있어서,

발포제가 존재하는 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 3

제2항에 있어서,

발포제가 물인 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 4

제1항에 있어서,

I가 하나 이상의 알칸올아민, 알콜 또는 아민의 비반응성 부분인 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 5

제4항에 있어서,

I가 하나 이상의 2-아미노에탄올, 에틸렌 글리콜, 프로필렌 글리콜, 1,3-디하이드록시프로판, 1,4-디하이드록시부탄, 1,6-디하이드록시헥산, 글리세롤, 1,2,4-트리하이드록시부탄, 1,2,6-트리하이드록시헥산, 1,1,1-트리메틸올에탄, 1,1,1-트리메틸올프로판, 펜타에리트리톨, 폴리카프로락톤, 크실리톨, 아라비톨, 소르비톨, 만니톨, 에틸렌 디아민, 글리세린, 암모니아, 1,2,3,4-테트라하이드록시부탄, 프럭토오스 또는 슈크로오스의 비반응성 부분인 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 6

제5항에 있어서,

계면활성제가 약 2 내지 약 4의 관능가를 갖는 폴리에테르인 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 7

제6항에 있어서,

계면활성제가 약 2 내지 약 3의 관능가를 갖는 폴리에테르인 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 8

제1항에 있어서,

계면활성제가 옥시에틸렌 단위와 옥시부틸렌 단위를 갖는 폴리에테르인 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 9

제8항에 있어서,

계면활성제가 촉매 그룹을 포함하는 개시제에 의해 제조되는 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 10

제1항에 있어서,

활성 수소 함유 화합물이 기본 폴리올인 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 11

제1항에 있어서,

실리콘 계면활성제를 포함하는 활성 수소 함유 조성물.

#### 청구항 12

폴리이소시아네이트 및 제1항에 따르는 활성 수소 함유 조성물을 포함하는 제형으로부터 제조한 중합체.

#### 청구항 13

제12항에 있어서,

발포체인 중합체.

#### 청구항 14

제13항에 있어서,

수 발포된 발포체인 중합체.

#### 청구항 15

제12항에 있어서,

폴리이소시아네이트가 톨루엔 디이소시아네이트, 메틸렌 디페닐디이소시아네이트, 폴리메틸렌 폴리페닐 폴리이소시아네이트, 개질된 메틸렌 디페닐디이소시아네이트, 메틸렌 디페닐디이소시아네이트 초기중합체, 폴리메틸렌 폴리페닐 폴리이소시아네이트 초기중합체 및 이들의 혼합물로 이루어진 그룹으로부터 선택되는 중합체.

#### 청구항 16

제15항에 있어서,

폴리이소시아네이트가 초기중합체이고, 초기중합체가 계면활성제[여기서, 계면활성제는 옥시에틸렌 단위 10 내지 90중량%와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위 10 내지 90중량%를 갖는 폴리에테르이고, 옥시프로필렌 단위를 실질적으로 포함하지 않는다]에 의해 제조되는 중합체.

#### 청구항 17

폴리이소시아네이트 및 제1항에 따르는 활성 수소 함유 조성물을 포함하는 중합체 제형을 혼합시킴을 포함하는, 중합체의 제조방법.

#### 청구항 18

제17항에 있어서,

중합체 제형이 발포제를 포함하고, 수득되는 중합체가 발포체인 방법.

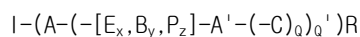
#### 청구항 19

옥시에틸렌 단위 10 내지 90중량%(옥시에틸렌 단위와 옥시알킬렌 단위의 총 중량을 기준으로 함)와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위 10 내지 90 중량%를 갖는 아민 또는 하이드록시 개시된 폴리에테르를 아민 또는 하이드록시 그룹과 반응성인 물질로 캡핑(capping)시킴을 포함하는 방법에 의해 제조된 조성물로서,

일반식  $I-(A-(-[E_x, B_y, P_z]-A'-(-C)_Q)_Q)R$  [여기서, I는 개시제의 비알콕시 반응성 부분이고, A 및 A'는 독립적으로 0, N 또는 NH이며, E는 옥시에틸렌 그룹이고, B는 옥시부틸렌 그룹이며, P는 옥시프로필렌 그룹이고, x 및 y는 x:y의 비가 1:4 내지 4:1로 되도록 하는 값이며, z는 옥시프로필렌 단위의 총 중량이 옥시에틸렌 단위와 옥시부틸렌 단위의 총 중량의 10% 미만으로 되도록 하는 값이고, R은 개시제의 관능가에 따라 1 내지 8이며, Q 및 Q'는 독립적으로 A 또는 A'가 0 또는 NH인 경우에는 1이고, A 또는 A'가 N인 경우에는 2이며, 화합물의 총 분자량은 750 내지 11,000이고, C는 캡핑 화합물의 잔기이며, E 및 B는 실질적으로 블록으로 존재하고, 단 개시제는 알킬페놀-알데하이드 축합 생성물이 아니다]를 갖는 조성물.

#### 청구항 20

다음 일반식을 갖는 물질의 조성물.



상기식에서,

I는 개시제의 비알콕시 반응성 부분이고,

A 및 A'는 독립적으로 0, N 또는 NH이며,



E는 옥시에틸렌 그룹이고,  
 B는 옥시부틸렌 그룹이며,  
 P는 옥시프로필렌 그룹이고,  
 x 및 y는 x:y의 비가 1:4 내지 4:1로 되도록 하는 값이며,  
 z는 옥시프로필렌 단위의 총 중량이 옥시에틸렌 단위와 옥시부틸렌 단위의 총 중량의 10% 미만으로 되도록 하는 값이고,  
 R은 개시제의 관능가에 따라 1 내지 8이며,  
 Q 및 Q'는 독립적으로 A 또는 A'가 0 또는 NH인 경우에는 1이고, A 또는 A'가 N인 경우에는 2이며,  
 화합물의 총 분자량은 750 내지 11,000이고,  
 C는 캡핑 화합물의 잔기이며,  
 E 및 B는 실질적으로 블록으로 존재하고,  
 단 개시제는 알킬페놀-알데하이드 축합 생성물이 아니다.

**청구항 21**

제1항 내지 제11항 중의 어느 한 항에 있어서,  
 촉매를 포함하는 활성 수소 함유 조성물.

**청구항 22**

제12항 내지 제16항 중의 어느 한 항에 있어서,  
 제형이 촉매를 포함하는 중합체.

**청구항 23**

폴리이소시아네이트(1),

제8항의 활성 수소 함유 조성물(2)(여기서, 비실리콘 계면활성제에서 1는 하나 이상의 2-아미노에탄올, 에틸렌 글리콜, 프로필렌 글리콜, 1,3-디하이드록시프로판, 1,4-디하이드록시부탄, 1,6-디하이드록시헥산, 글리세롤, 1,2,4-트리하이드록시부탄, 1,2,6-트리하이드록시헥산, 1,1,1-트리메틸올에탄, 1,1,1-트리메틸올프로판, 펜타에리트리톨, 폴리카프로락톤, 크실리톨, 아라비톨, 소르비톨, 만니톨, 에틸렌 디아민, 글리세린, 암모니아, 1,2,3,4-테트라하이드록시부탄, 프락토오즈 또는 슈크로오즈의 비반응성 부분이다),

반응 혼합물을 발포시키기에 충분한 양의 발포제(3) 및

폴리우레탄 또는 폴리이소시아누레이트의 형성을 촉매하는 하나 이상의 촉매(4)를 포함하는 제형으로부터 제조한 중합체 발포체.

**청구항 24**

제17항 또는 제18항에 있어서,  
 중합체 제형이 촉매를 포함하는 방법.

**청구항 25**

다관능성 활성 수소 함유 화합물(A),  
 발포제(B),  
 촉매 (C) 및

활성 수소 화합물 100부당 0.25 내지 20부의 아민- 또는 하이드록시 개시된 폴리에테르인 비실리콘 계면활성제(D)[여기서, 비실리콘 계면활성제(D)는 옥시에틸렌 단위(i) 10 내지 90중량%와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위(ii) 10 내지 90중량%(여기서, 중량%는 비실리콘 계면활성제 중의 옥시에틸렌 단위와 옥시알킬렌 단위의 총 중량을 기준으로 함)를 갖고, 옥시프로필렌 단위를 실질적으로 포함하지 않으며, 단 알킬페놀-알데하이드 축합 생성물 개시제를 기본으로 하는 폴리에테르가 아니다]를 포함하는 활성 수소 함유 조성물.

**청구항 26**

폴리이소시아네이트 및 제25항에 따르는 활성 수소 함유 조성물을 포함하는 제형으로부터 제조된 중합체.

**청구항 27**

제26항에 있어서,  
 수 발포된 발포체인 중합체.

**요약**

본 발명은 비실리콘 폴리에테르 계면활성제를 포함하는 제형으로부터 제조할 수 있는 폴리우레탄, 폴리이소시아누레이트 및 폴리우레아 중합체, 특히 발포된 중합체에 관한 것이다. 비실리콘 폴리에테르 계면활성제는 옥시에틸렌 단위 약 10 내지 약 90중량%와 탄소수 4 이상의 옥시알킬렌 단위 약 10 내지 약 90중량%를 갖는 폴리에테르이다. 비실리콘 폴리에테르 계면활성제는 종래의 실리콘계 계면활성제를 사용하여 제조한 발포체와 실질적으로 동일한 특성을 갖는 발포체를 제조하는 데 사용할 수 있다.