

WSGR N.º de expediente. 48005-705.601

FORMACIÓN DE ÉSTERES DE ÁCIDO TEREFTÁLICO

REFERENCIA CRUZADA

[0001] La presente solicitud de patente reivindica el beneficio de la solicitud estadounidense n.º 15/706,484, presentada el 15 de setiembre de 2017, que se incorpora a la presente en su totalidad mediante esta referencia.

CAMPO DE LA INVENCION

[0002] La presente descripción se refiere a la formación de derivados de éster a partir de poliésteres y más específicamente a la formación de ésteres de ácido tereftálico a partir de polietileno tereftalato (PET) o poli(etilenglicol-co-1,4-ciclohexanodimetanol tereftalato) (PETG). La presente descripción también se refiere a la formación de dimetil tereftalato (DMT). La presente descripción también se refiere a la formación de monoetilenglicol (MEG).

ANTECEDENTES DE LA INVENCION

[0003] El mercado de resina en botellas de polietileno tereftalato (PET) ha crecido considerablemente a medida que las resinas PET remplazaron el vidrio en las bebidas gaseosas, agua embotellada y envases para alimentos.

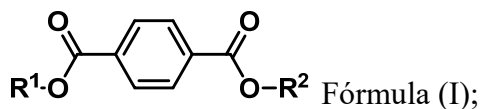
[0004] El dimetil tereftalato (DMT) se usa principalmente en la fabricación de polietileno tereftalato (PET) para aplicaciones con fibras, películas, plásticos para envases, y plásticos especiales.

[0005] El mayor sector de poliésteres es el mercado de fibras donde se usa para fabricar vestimenta, textiles para el hogar como sábanas y cortinas, alfombras y tapetes, y productos industriales como refuerzos para neumáticos, cinturones de seguridad, cuerdas y mangueras. La película de PET se usa en aplicaciones eléctricas como capacitores de hoja metálica y dieléctricos y envases para alimentos.

[0006] El crecimiento en el poliéster no se convirtió en la demanda del DMT. Para la mayoría de los grados de poliéster usado en textiles y envases para alimentos y bebidas, es más económico usar ácido tereftálico purificado en vez de DMT.

COMPENDIO DE LA INVENCION

[0007] En la presente se describe un proceso para la transformación de un poliéster que se selecciona del grupo que consiste en polietileno tereftalato y poli(etilenglicol-co-1,4-ciclohexanodimetanol tereftalato) en un tereftalato de Fórmula (I):



donde R¹ y R² se seleccionan independientemente del grupo que consiste en hidrógeno, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₈ opcionalmente sustituido, (alquilo C₁-C₆)(cicloalquilo C₃-C₈) opcionalmente sustituido, arilo opcionalmente sustituido, y (alquilo C₁-C₆)(arilo) opcionalmente sustituido; siempre que uno de R¹ o R² no sea hidrógeno;

donde el proceso comprende mezclar el poliéster con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el poliéster;
- (b) un solvente alcohólico; y
- (c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[0001] En alguna modalidad del proceso, R¹ o R² es metilo.

[0002] En alguna modalidad del proceso, un solvente alcohólico se selecciona del grupo que consiste en metanol, etanol, n-propanol, isopropanol, t-butanol, etilenglicol, glicerol, ciclohexano-1,4-diildimetanol, fenol, bencil alcohol, y cualquier combinación de estos.

[0003] En alguna modalidad del proceso, el solvente alcohólico es metanol.

[0004] En alguna modalidad del proceso, el solvente para hinchar el poliéster se selecciona del grupo que consiste en un solvente no polar, un solvente polar aprótico, un solvente polar prótico y cualquier combinación de estos.

[0005] En alguna modalidad del proceso, el solvente para hinchar el poliéster se selecciona del grupo que consiste en DMSO, DMF, acetona, un solvente halogenado, n-hexano, nitrobenzeno, metanol, bencil alcohol, benzaldehído y cualquier combinación de estos.

[0006] En alguna modalidad del proceso, el solvente para hinchar el poliéster es un solvente halogenado.

[0007] En alguna modalidad del proceso, el solvente para hinchar el poliéster es un metanol.

[0008] En alguna modalidad del proceso, la relación de solvente para hinchar el poliéster a solvente alcohólico es entre alrededor de 0,1:1 y alrededor de 2:1 (p:p).

[0009] En alguna modalidad del proceso, la relación de solvente para hinchar el poliéster a solvente alcohólico es entre alrededor de 0,5:1 y alrededor de 1:1 (p:p).

[0010] En alguna modalidad del proceso, el alcóxido se selecciona del grupo que consiste en un alcóxido de metal alcalino, un alcóxido de metal alcalinotérreo, un alcóxido de metal, un alcóxido de amonio y cualquier combinación de estos.

- [0011] En alguna modalidad del proceso, el alcóxido se selecciona del grupo que consiste en metóxido de sodio, etóxido de potasio, tri-n-propóxido de aluminio, y metóxido de tetrabutylamonio.
- [0012] En alguna modalidad del proceso, el alcóxido es metóxido de sodio.
- [0013] En alguna modalidad del proceso, el alcóxido se genera in situ por la adición de un metal alcalino, metal alcalinotérreo o un metal al solvente alcohólico.
- [0014] En alguna modalidad del proceso, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 15:1 y alrededor de 125:1 (p:p).
- [0015] En alguna modalidad del proceso, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 20:1 y alrededor de 25:1 (p:p).
- [0016] En alguna modalidad del proceso, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 15:1 y alrededor de 60:1 (p:p).
- [0017] En alguna modalidad del proceso, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 20:1 y alrededor de 50:1 (p:p).
- [0018] En alguna modalidad del proceso, el proceso se realiza hasta que se alcanza alrededor de 80% de rendimiento del tereftalato de Fórmula (I).
- [0019] En alguna modalidad del proceso, el proceso se realiza sin calor externo.
- [0020] En alguna modalidad del proceso, el proceso se realiza a una temperatura entre alrededor de 25 °C y alrededor de 85 °C.
- [0021] En alguna modalidad del proceso, el proceso se realiza a una temperatura entre alrededor de 25 °C y alrededor de 80 °C.
- [0022] En alguna modalidad del proceso, el proceso se realiza a presión atmosférica.
- [0023] En alguna modalidad del proceso, el poliéster es polietileno tereftalato.
- [0024] En alguna modalidad del proceso, el proceso comprende además recuperar monoetilenglicol (MEG).
- [0025] En alguna modalidad del proceso, el poliéster está en forma de láminas de polímero y es parte de una materia prima.
- [0026] En alguna modalidad del proceso, el tamaño promedio de partícula de las láminas de polímero se encuentra entre 1 mm y 20 mm.
- [0027] En alguna modalidad del proceso, el tamaño de partícula de las láminas de polímero se encuentra entre 1 mm y 5 mm.
- [0028] También se describe en la presente un proceso para la transformación de polietileno tereftalato en dimetil tereftalato, que comprende mezclar el polietileno tereftalato con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el polietileno tereftalato;

(b) metanol; y

(c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[0029] En alguna modalidad del proceso, el solvente para hinchar el polietileno tereftalato se selecciona del grupo que consiste en un solvente halogenado, DMSO, bencil alcohol, metanol y cualquier combinación de estos.

[0030] En alguna modalidad del proceso, el solvente para hinchar el polietileno tereftalato es un solvente halogenado.

[0031] En alguna modalidad del proceso, el solvente para hinchar el polietileno tereftalato es metanol.

[0032] En alguna modalidad del proceso, la relación de polietileno tereftalato a alcóxido es entre alrededor de 20:1 y alrededor de 25:1 (p:p).

[0033] En alguna modalidad del proceso, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 15:1 y alrededor de 60:1 (p:p).

[0034] En alguna modalidad del proceso, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 20:1 y alrededor de 50:1 (p:p).

[0035] En alguna modalidad del proceso, el alcóxido se selecciona del grupo que consiste en metóxido de sodio, etóxido de potasio, tri-n-propóxido de aluminio, y metóxido de tetrabutilamonio.

[0036] En alguna modalidad del proceso, el alcóxido es metóxido de sodio.

[0037] En alguna modalidad del proceso, la relación de solvente para hinchar el polietileno tereftalato a metanol es entre alrededor de 0,5:1 y alrededor de 1:1 (p:p).

[0038] En alguna modalidad del proceso, el proceso se realiza hasta que se alcanza alrededor de 80% de rendimiento de dimetil tereftalato.

[0039] En alguna modalidad del proceso, el proceso se realiza sin calor externo.

[0040] En alguna modalidad del proceso, el proceso se realiza a una temperatura entre alrededor de 25 °C y alrededor de 85 °C.

[0041] En alguna modalidad del proceso, el proceso se realiza a una temperatura entre alrededor de 25 °C y alrededor de 80 °C.

[0042] En alguna modalidad del proceso, el proceso se realiza a presión atmosférica.

[0043] En alguna modalidad del proceso, el proceso comprende además recuperar monoetilenglicol (MEG).

[0044] En alguna modalidad del proceso, el polietileno tereftalato está en forma de láminas de polímero y es parte de una materia prima.

[0045] En alguna modalidad del proceso, el tamaño de partícula de las láminas de polímero se encuentra entre 1 mm y 20 mm.

[0046] En alguna modalidad del proceso, el tamaño de partícula de las láminas de polímero se encuentra entre 1 mm y 5 mm.

[0047] En la presente también se provee dimetil tereftalato (DMT) preparado usando un proceso descrito en la presente.

[0048] En la presente también se provee monoetilenglicol (MEG) preparado usando un proceso descrito en la presente.

[0049] En la presente también se provee una mezcla de reacción que comprende:

- (a) un poliéster que se selecciona de un polietileno tereftalato y poli(etilenglicol-co-1,4-ciclohexanodimetanol tereftalato);
- (b) un solvente para hinchar el poliéster;
- (c) un solvente alcohólico; y
- (d) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[0050] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, el solvente alcohólico se selecciona del grupo que consiste en metanol, etanol, n-propanol, isopropanol, t-butanol, etilenglicol, glicerol, ciclohexano-1,4-diildimetanol, fenol, bencil alcohol, y cualquier combinación de estos.

[0051] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, el solvente para hinchar el poliéster se selecciona del grupo que consiste en un solvente no polar, un solvente polar aprótico, un solvente polar prótico, y cualquier combinación de estos.

[0052] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, el solvente para hinchar el poliéster es un solvente halogenado.

[0053] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, el solvente para hinchar el poliéster es metanol.

[0054] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, el solvente alcohólico es metanol.

[0055] En alguna modalidad de la mezcla de reacción, la relación de solvente para hinchar el poliéster a solvente alcohólico es entre alrededor de 0,5:1 y alrededor de 1:1 (p:p).

[0056] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 15:1 y alrededor de 30:1 (p:p).

[0057] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, la relación de polietileno tereftalato a alcóxido es entre alrededor de 20:1 y alrededor de 25:1 (p:p).

[0058] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 15:1 y alrededor de 60:1 (p:p).

[0059] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 20:1 y alrededor de 50:1 (p:p).

[0060] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, el alcóxido se selecciona del grupo que consiste en metóxido de sodio, etóxido de potasio, tri-n-propóxido de aluminio, y metóxido de tetrabutylamonio.

[0061] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, el alcóxido es metóxido de sodio.

[0062] En alguna modalidad de una mezcla de reacción, el poliéster es polietileno tereftalato.

DESCRIPCIÓN DETALLADA DE LA INVENCION

[0063] Dimetil tereftalato (DMT) se usa en la producción de poliésteres, que incluye polietileno tereftalato (PET), politrimetileno tereftalato (PTT), y polibutileno tereftalato (PBT). Debido a que el DMT es volátil, es un intermedio en algunos esquemas para el reciclaje de PET, p. ej., de botellas de plástico. La hidrogenación de DMT proporciona el diol 1, 4-ciclohexanodimetanol, que es un monómero útil en la formación de resinas de poliéster.

[0064] DMT se ha producido de diversos modos. Convencionalmente y aun de valor comercial es la esterificación directa del ácido tereftálico. De manera alternativa, se prepara alternando los pasos de oxidación y esterificación con metilo de para-xileno por metil para-toluoato. El método para la producción de DMT de para-xileno y metanol consiste en cuatro pasos principales: oxidación, esterificación, destilación y cristalización. Una mezcla de para-xileno y éster para-toluico se oxida con aire en presencia de un catalizador de metal de transición (Co/Mn). La mezcla de ácido resultante de la oxidación se esterifica con metanol para producir una mezcla de ésteres. La mezcla de éster bruto se destiló para retirar todas las calderas pesadas y residuo producido; los ésteres más livianos se reciclaron hasta la sección de oxidación. El DMT crudo se recrystalizó luego para retirar isómeros de DMT, ácidos residuales, y aldehídos aromáticos.

[0065] Una mejora en la producción de DMT a partir del reciclaje de PET: debido al creciente uso de PET y PETG en las industrias de envasado y fibras (alfombras y otros textiles) existe una necesidad de encontrar un modo con ahorro de energía y eficiente, de alto rendimiento y económico de formar DMT a partir de PET o PETG.

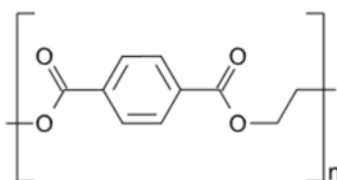
POLIÉSTERES

[0066] En la presente se describe un proceso para la transformación de un poliéster en un derivado de éster; donde el proceso comprende mezclar el poliéster con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el poliéster;
- (b) un solvente alcohólico; y
- (c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

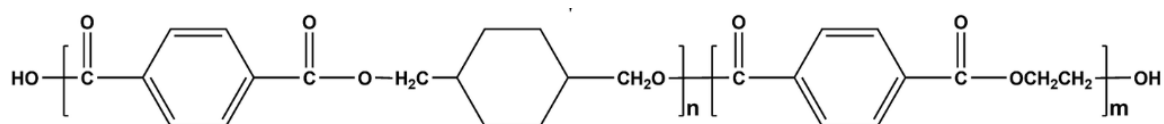
[0067] En algunas modalidades, el poliéster se selecciona de polietileno tereftalato (PET), poli(etilenglicol-co-1,4-ciclohexanodimetanol tereftalato) (PETG), poliglicólido o ácido poliglicólico (PGA), ácido poliláctico (PLA), policaprolactona (PCL), polihidroxibutirato (PHB), polietileno adipato (PEA), polibutileno succinato (PBS), poli(3-hidroxibutirato-co-3-hidroxisvalerato) (PHBV), polibutileno tereftalato (PBT), politrimetileno tereftalato (PTT), polietileno naftalato (PEN), Vectran[®], cutina, y cualquier combinación de estos.

[0068] En algunas modalidades, el poliéster es polietileno tereftalato (PET):

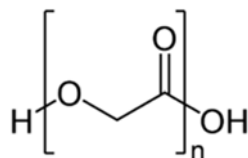


[0069] En algunas modalidades, el poliéster es un oligómero de ácido tereftálico/etilenglicol.

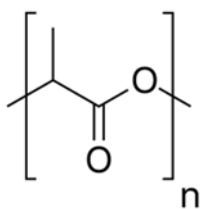
[0070] En algunas modalidades, el poliéster es poli(etilenglicol-co-1,4-ciclohexanodimetanol tereftalato) (PETG):



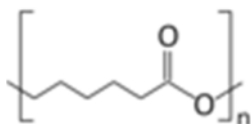
[0071] En algunas modalidades, el poliéster es poliglicólido o ácido poliglicólico (PGA).



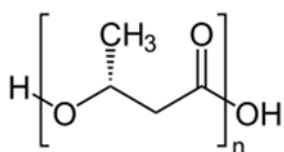
[0072] En algunas modalidades, el poliéster es ácido poliláctico (PLA):



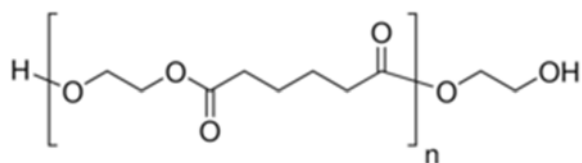
[0073] En algunas modalidades, el poliéster es policaprolactona (PCL):



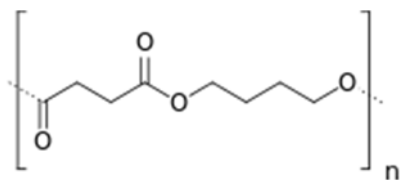
[0074] En algunas modalidades, el poliéster es polihidroxibutirato (PHB):



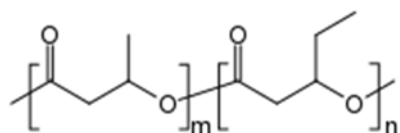
[0075] En algunas modalidades, el poliéster es polietileno adipato (PEA):



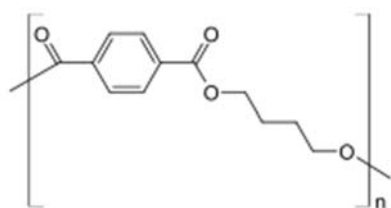
[0076] En algunas modalidades, el poliéster es polibutileno succinato (PBS):



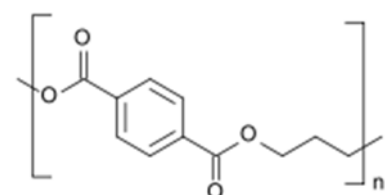
[0077] En algunas modalidades, el poliéster es poli(3-hidroxibutirato-co-3-hidroxivalerato) (PHBV):



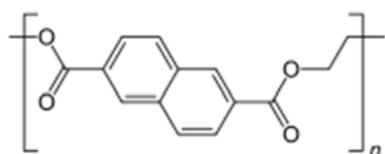
[0078] En algunas modalidades, el poliéster es polibutileno tereftalato (PBT):



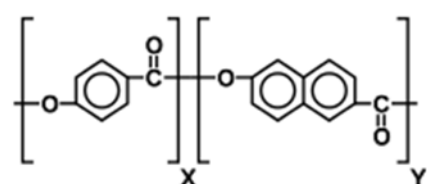
[0079] En algunas modalidades, el poliéster es politrimetileno tereftalato (PTT):



[0080] En algunas modalidades, el poliéster es polietileno naftalato (PEN):



[0081] En algunas modalidades, el poliéster es Vectran®:



[0082] En algunas modalidades, el poliéster es cutina. La cutina es uno de los dos polímeros cerosos que son los componentes principales de la cutícula de la planta, que cubre todas las superficies de las plantas. La cutina consiste en ácidos omega hidroxí y sus derivados, que se entrelazan por enlaces de éster, formando un polímero de poliéster. Existen dos familias monoméricas de cutina principales, las familias C16 y C18. La familia C16 consiste principalmente en ácido 16-hidroxí palmítico y ácido 9,16- o 10,16-dihidroxí palmítico. La familia C18 consiste principalmente en ácido 18-hidroxí oleico, ácido 9,10-epoxi-18-hidroxí esteárico y 9,10,18-trihidroxíestearato. La cutina del tomate consiste en ácido 16-hidroxí palmítico y ácido 10,16-dihidroxí palmítico donde el 10-isómero es mayormente dominante. La cutina del tomate es un biopolímero de poliéster interesterificado. La proporción considerable de ésteres secundarios (esterificación en hidroxilo C-10 secundario) muestra que la estructura de poliéster es considerablemente ramificada.

[0083] En algunas modalidades, el poliéster está en materia prima que comprende contaminantes como polímeros adicionales (por ejemplo polietileno, polipropileno, polivinil cloruro (PVC), papel, colorantes, suciedad, etilén vinil alcohol (EvOH), policarbonato (PC), polivinilideno cloruro (PVDC), etilén vinil acetato (EVA), pegamento, poliamida, o cualquier combinación de estos. En algunas modalidades, la materia prima comprende entre 5% y alrededor de 20% de contaminantes.

[0084] Mishra et ál. (Kinetic and thermodynamic study of methanolysis of poly(ethylene terephthalate) waste powder Polym. Int. 52:337-342 (2003)) demostraron que el aumento del tamaño de partícula de las láminas de PET provoca una disminución en la despolimerización. Mishra et ál. registraron 127,5µm como el tamaño de partícula óptimo. Existe una necesidad de un proceso de despolimerización que permita el uso de láminas de polímero más grandes. En algunas modalidades, la materia prima comprende láminas de polímero. En algunas modalidades, el tamaño de partícula de las láminas de polímero promedio se encuentra entre 1 mm y 20 mm. En algunas modalidades, el tamaño de partícula de las láminas de polímero promedio se encuentra entre 1 mm y 15 mm. En algunas modalidades, el tamaño de partícula de las láminas de polímero promedio se encuentra entre 1 mm y 10 mm. En algunas modalidades, el tamaño de partícula de las láminas de polímero promedio se encuentra entre 1 mm y 5 mm.

DERIVADOS DE ÉSTERES

[0085] En la presente se describe un proceso para la transformación de un poliéster en un derivado de éster; donde el proceso comprende mezclar el poliéster con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el poliéster;

(b) un solvente alcohólico; y

(c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[0086] En algunas modalidades, el poliéster es poliglicólico o ácido poliglicólico (PGA) y el derivado del éster es un derivado de 2-hidroxiacetato. En algunas modalidades, el derivado del éster es metil 2-hidroxiacetato.

[0087] En algunas modalidades, el poliéster es ácido poliláctico (PLA) y el derivado del éster es un derivado de 2-hidroxiopropanoato. En algunas modalidades, el derivado del éster es metil 2-hidroxiopropanoato.

[0088] En algunas modalidades, el poliéster es policaprolactona (PCL) y el derivado del éster es un derivado de 6-hidroxihexanoato. En algunas modalidades, el derivado del éster es un metil 6-hidroxihexanoato.

[0089] En algunas modalidades, el poliéster es polihidroxibutirato (PHB) y el derivado del éster es un derivado de hidroxibutirato. En algunas modalidades, el derivado del éster es metil hidroxibutirato

[0090] En algunas modalidades, el poliéster es polietileno adipato (PEA) y el derivado del éster es un derivado de adipato. En algunas modalidades, el derivado del éster es dimetil adipato.

[0091] En algunas modalidades, el poliéster es polibutileno succinato (PBS) y el derivado del éster es un derivado de succinato. En algunas modalidades, el derivado del éster es dimetil succinato.

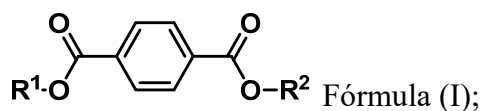
[0092] En algunas modalidades, el poliéster es poli(3-hidroxibutirato-co-3-hidroxivalerato) (PHBV) y el derivado del éster es un derivado de hidroxibutirato, un derivado de hidroxivalerato, o una combinación de estos. En algunas modalidades, el derivado del éster es metil hidroxibutirato, metil hidroxivalerato, o una combinación de estos.

[0093] En algunas modalidades, el poliéster es polietileno naftaleno (PEN) y el derivado del éster es un derivado naftalato. En algunas modalidades, el derivado del éster es dimetil naftalato.

[0094] En algunas modalidades, el poliéster es vectram y el derivado del éster es un derivado de naftoato, un derivado de benzoato, o una combinación de estos. En algunas modalidades, el derivado del éster es metil hidroxinaftoato o metil hidroxibenzoato.

[0095] En algunas modalidades, el poliéster es cutina y el derivado del éster es un derivado de hidroxipalmitato o un dihidroxipalmitato. En algunas modalidades, el derivado del éster es metil hidroxipalmitato o metil dihidroxipalmitato.

[0096] En algunas modalidades, el poliéster es polietileno tereftalato (PET), poli(etilen glicol-co-1,4-ciclohexanodimetanol tereftalato) (PETG), politrimetileno tereftalato (PTT), o polibutileno tereftalato (PBT) y el derivado del éster es un derivado de tereftalato. En algunas modalidades, el derivado de tereftalato es un compuesto de fórmula (I):



donde R¹ y R² se seleccionan independientemente de hidrógeno, alquilo C₁-C₆, haloalquilo C₁-C₆, hidroxialquilo C₁-C₆, cicloalquilo C₃-C₈ opcionalmente sustituido, (alquilo C₁-C₆)(cicloalquilo C₃-C₈) opcionalmente sustituido, arilo opcionalmente sustituido, y (alquilo C₁-C₆)(arilo) opcionalmente sustituido; siempre que uno de R¹ o R² no sea hidrógeno.

[0097] En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son independientemente alquilo C₁-C₆ o hidroxialquilo C₁-C₆.

[0098] En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son independientemente alquilo C₁-C₆. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son independientemente metilo, etilo, propilo, isopropilo o butilo. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son independientemente metilo o etilo. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son metilo. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son etilo. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² no son hidrógeno.

[0099] En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son independientemente hidroxialquilo C₁-C₆. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son independientemente hidroxietilo o propanodiol. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son hidroxietilo. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son 2-hidroxietilo. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son dihidroxipropilo. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son 2,3-dihidroxipropilo.

[00100] En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son independientemente (alquilo C₁-C₆)(cicloalquilo C₃-C₈) opcionalmente sustituido. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son independientemente (alquilo C₁-C₆)(cicloalquilo C₃-C₈) sustituido. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son 4-(hidroximetil)ciclohexil)metilo.

[00101] En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son independientemente arilo opcionalmente sustituido. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son fenilo.

[00102] En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son independientemente (alquilo C₁-C₆)(arilo) opcionalmente sustituido. En algunas modalidades de un compuesto de Fórmula (I), R¹ y R² son bencilo.

[00103] En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 10% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 9% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 8% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 7% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 6% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 5% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 4% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 3% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 2% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 1% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 0,5% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 0,4% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 0,3% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 0,2% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 0,1% de impureza (p/p).

[00104] En algunas modalidades, el derivado del éster contiene menos de alrededor de 250 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 240 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 230 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 220 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 210 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 200 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 190 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 180 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 170 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 160 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 150 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 140 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 130 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 120 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 110 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 100 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 90 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 80 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 70 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 60 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 50 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 40 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 30 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 20 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 10 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 5 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 4 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 3 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 2 ppm de cualesquiera metales, menos

de alrededor de 1 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,9 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,8 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,7 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,6 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,5 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,4 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,3 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,2 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,1 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,09 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,08 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,07 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,06 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,05 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,04 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,03 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,02 ppm de cualesquiera metales, o menos de alrededor de 0,01 ppm de cualesquiera metales.

GLICOL

[00105] En la presente se describe un proceso para la transformación de un poliéster en un derivado de éster; donde el proceso comprende mezclar el poliéster con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el poliéster;
- (b) un solvente alcohólico; y
- (c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[00106] En algunas modalidades, el proceso también comprende la formación de glicol. En algunas modalidades, el glicol es mono etilenglicol (MEG) (o etilenglicol). En algunas modalidades, el glicol es propilenglicol. En algunas modalidades, el glicol es butilenglicol.

[00107] En algunas modalidades, el glicol se obtiene entre alrededor de 80 y alrededor de 99 mol% de rendimiento. En algunas modalidades, el glicol se obtiene entre alrededor de 85 y alrededor de 99 mol% de rendimiento. En algunas modalidades, el glicol se obtiene entre alrededor de 90 y alrededor de 99 mol% de rendimiento. En algunas modalidades, el glicol se obtiene en al menos alrededor de 80 mol% de rendimiento. En algunas modalidades, el glicol se obtiene en al menos alrededor de 85 mol% de rendimiento.

[00108] En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 10% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 9% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 8% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 7% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 6% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 5% de impureza (p/p). En algunas

modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 4% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 3% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 2% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 1% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 0,5% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 0,4% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 0,3% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 0,2% de impureza (p/p). En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 0,1% de impureza (p/p).

[00109] En algunas modalidades, el glicol contiene menos de alrededor de 250 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 240 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 230 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 220 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 210 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 200 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 190 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 180 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 170 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 160 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 150 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 140 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 130 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 120 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 110 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 100 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 90 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 80 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 70 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 60 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 50 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 40 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 30 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 20 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 10 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 5 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 4 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 3 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 2 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 1 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,9 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,8 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,7 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,6 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,5 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,4 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,3 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,2 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,1 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,09 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,08 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,07 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,06

ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,05 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,04 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,03 ppm de cualesquiera metales, menos de alrededor de 0,02 ppm de cualesquiera metales, o menos de alrededor de 0,01 ppm de cualesquiera metales.

SOLVENTE ALCOHÓLICO

[00110] En la presente se describe un proceso para la transformación de un poliéster en un derivado de éster; donde el proceso comprende mezclar el poliéster con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el poliéster;
- (b) un solvente alcohólico; y
- (c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[00111] En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente comprende un solvente alcohólico. En algunas modalidades, el solvente alcohólico es un alcohol lineal, un alcohol ramificado, un alcohol cíclico, o cualquier combinación de estos. En algunas modalidades, el solvente alcohólico se selecciona de metanol, etanol, n-propanol, isopropanol, t-butanol, etilenglicol, glicerol, ciclohexano-1,4-diildimetanol, fenol, bencil alcohol, y cualquier combinación de estos.

[00112] En algunas modalidades, el solvente alcohólico es un alcohol C₁-C₄ lineal. En algunas modalidades, el solvente alcohólico es metanol, etanol, propanol, butanol, o una combinación de estos. En algunas modalidades, el solvente alcohólico es metanol, etanol, propanol, o una combinación de estos. En algunas modalidades, el solvente alcohólico es metanol. En algunas modalidades, el alcohol es etanol. En algunas modalidades, el solvente alcohólico es un alcohol C₃-C₄ ramificado. En algunas modalidades, el solvente alcohólico es t-butanol, s-butanol, i-butanol, i-propanol, o una combinación de estos. En algunas modalidades, el solvente alcohólico es un alcohol C₃-C₈ cíclico. En algunas modalidades, el solvente alcohólico es ciclopropanol, ciclobutanol, ciclopentanol, ciclohexanol, cicloheptanol, ciclohexano-1,4-diildimetanol, o cualquier combinación de estos. En algunas modalidades, el solvente alcohólico es ciclohexano-1,4-diildimetanol.

[00113] En algunas modalidades, el solvente alcohólico es un poliol. En algunas modalidades, el solvente alcohólico se selecciona de etilenglicol, glicerol y una combinación de estos.

[00114] En algunas modalidades, el solvente alcohólico se selecciona de fenol, bencil alcohol, y cualquier combinación de estos.

SOLVENTE PARA HINCHAR EL POLIÉSTER

[00115] En la presente se describe un proceso para la transformación de un poliéster en un derivado de éster; donde el proceso comprende mezclar el poliéster con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el poliéster;
- (b) un solvente alcohólico; y
- (c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[00116] En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente comprende pre-tratar el poliéster con un solvente antes de la adición del solvente alcohólico y alcóxido. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante entre alrededor de 5 mins y alrededor de 60 mins antes de la adición del solvente alcohólico y alcóxido. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante entre alrededor de 5 mins y alrededor de 40 mins antes de la adición del solvente alcohólico y alcóxido. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante entre alrededor de 5 mins y alrededor de 20 mins antes de la adición del solvente alcohólico y alcóxido. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante entre alrededor de 5 mins y alrededor de 10 mins antes de la adición del solvente alcohólico y alcóxido. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 5 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 10 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 15 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 20 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 25 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 30 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 35 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 40 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 45 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 50 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 55 mins. En algunas modalidades, el pre-tratamiento con el solvente para hinchar el poliéster se realiza durante alrededor de 60 mins.

[00117] En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente comprende tratar el poliéster con un solvente para hinchar el poliéster al mismo tiempo que la adición del solvente alcohólico y alcóxido.

[00118] En algunas modalidades, el solvente para hinchar el poliéster se selecciona de un solvente no polar, un solvente polar aprótico, un solvente polar prótico y cualquier combinación de estos.

[00119] En algunas modalidades, el solvente para hinchar el poliéster se selecciona de dimetil sulfóxido (DMSO), *N,N*-dimetilformamida (DMF), acetona, un solvente halogenado, *n*-hexano, nitrobenzeno, metanol, bencil alcohol, benzaldehído, y cualquier combinación de estos. En algunas modalidades, el solvente para hinchar el poliéster se selecciona de DMSO, un solvente halogenado, y cualquier combinación de estos. En algunas modalidades, el solvente para hinchar el poliéster es DMSO. En algunas modalidades, el solvente para hinchar el poliéster es un solvente halogenado. En algunas modalidades, el solvente para hinchar el poliéster es un solvente clorinado. En algunas modalidades, el solvente para hinchar el poliéster diclorometano, dicloroetano, tetracloroetano, cloroformo, tetraclorometano, tricloroetano, o cualquier combinación de estos. En algunas modalidades, el solvente para hinchar el poliéster es diclorometano. En algunas modalidades, el solvente para hinchar el poliéster es metanol.

[00120] En algunas modalidades, la relación de solvente para hinchar el poliéster a solvente alcohólico es entre alrededor de 0,1:1 y alrededor de 2:1 (p:p). En algunas modalidades, la relación de solvente para hinchar el poliéster a solvente alcohólico es entre alrededor de 1:1 y alrededor de 2:1 (p:p). En algunas modalidades, la relación de solvente para hinchar el poliéster a solvente alcohólico es entre alrededor de 0,1:1 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 0,2:1 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 0,3:1 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 0,4:1 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 0,5:1 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 0,6:1 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 0,7:1 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 0,8:1 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 0,9:1 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 1:1 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 1:2 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 1:3 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 1:4 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 1:4 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 1:6 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 1:7 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 1:8 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 1:9 y alrededor de 2:1 (p:p), o entre alrededor de 0,5:1 y alrededor de 1,5:1 (p:p), o entre alrededor de 0,8:1 y alrededor de 1,2:1 (p:p), o entre alrededor de 0,5:1 y alrededor de 1:1 (p:p), o entre alrededor de 1:1 y alrededor de 1,5:1 (p:p). En algunas modalidades, la relación de solvente para hinchar el poliéster a solvente alcohólico es entre alrededor de 0,5:1 y alrededor de 1:1 (p:p).

ALCÓXIDOS

[00121] En la presente se describe un proceso para la transformación de un poliéster en un derivado de éster; donde el proceso comprende mezclar el poliéster con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el poliéster;
- (b) un solvente alcohólico; y
- (c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[00122] En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente comprende agregar una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido. En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente comprende agregar una cantidad catalítica de un alcóxido.

[00123] “Cantidad sub-estequiométrica”, como se usa en la presente, se usa para indicar que la cantidad de material usado es menor que una cantidad estequiométrica. El término se usa en la presente de manera intercambiable con “cantidad catalítica”. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 95% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 90% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 85% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 80% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 75% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 70% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 65% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 60% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 55% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 50% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 45% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 40% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 35% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 30% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 25% de una cantidad estequiométrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequiométrica es menor de o igual a alrededor de 20% de una cantidad

estequimétrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequimétrica es menor de o igual a alrededor de 15% de una cantidad estequimétrica. En algunas modalidades, una cantidad sub-estequimétrica es menor de o igual a alrededor de 10% de una cantidad estequimétrica.

[00124] “Cantidad estequimétrica”, como se usa en la presente, se usa para indicar que la cantidad de material usado es equivalente a la cantidad de enlaces de éster presentes en el poliéster.

[00125] En algunas modalidades, el alcóxido, que comprende un anión de alcóxido y un catión se selecciona de un alcóxido de metal alcalino, un alcóxido de metal alcalinotérreo, un alcóxido de metal, un alcóxido de amonio y cualquier combinación de estos. En algunas modalidades, el anión de alcóxido es un anión de alcóxido C₁-C₄. En algunas modalidades, el anión de alcóxido s selecciona de metóxido, etóxido, n-propóxido, n-butóxido, t-butóxido, sec-butóxido, iso-butóxido, iso-propóxido, y una combinación de estos. En algunas modalidades, el anión de alcóxido es metóxido, etóxido, o cualquier combinación de estos. En algunas modalidades, el anión de alcóxido es metóxido. En algunas modalidades, el catión es litio, sodio, potasio, magnesio, calcio, estroncio, bario, zinc, aluminio o amonio. En algunas modalidades, el alcóxido es metóxido de sodio, etóxido de potasio, o tri-n-propóxido de aluminio. En algunas modalidades, el alcóxido de amonio es un alcóxido de tetraalquilamonio. En algunas modalidades, el alcóxido de amonio es un alcóxido de tetrabutilamonio. En algunas modalidades, el alcóxido es metóxido de sodio, etóxido de potasio, tri-n-propóxido de aluminio, o metóxido de tetrabutilamonio.

[00126] En algunas modalidades, el alcóxido se genera in situ por la adición de un metal alcalino, metal alcalinotérreo o un metal al solvente alcohólico.

[00127] En algunas modalidades, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 15:1 y alrededor de 125:1 (p:p), o entre alrededor de 15:1 y alrededor de 100:1 (p:p), o entre alrededor de 15:1 y alrededor de 80:1 (p:p), o entre alrededor de 15:1 y alrededor de 60:1 (p:p), o entre alrededor de 15:1 y alrededor de 40:1 (p:p), o entre alrededor de 15:1 y alrededor de 25:1 (p:p), o entre alrededor de 15:1 y alrededor de 20:1 (p:p), o entre alrededor de 20:1 y alrededor de 25:1 (p:p), o entre alrededor de 20:1 y alrededor de 50:1 (p:p), o entre alrededor de 30:1 y alrededor de 60:1 (p:p), o entre alrededor de 40:1 y alrededor de 70:1 (p:p), o entre alrededor de 50:1 y alrededor de 80:1 (p:p), o entre alrededor de 60:1 y alrededor de 90:1 (p:p), o entre alrededor de 20:1 y alrededor de 125:1 (p:p), o entre alrededor de 40:1 y alrededor de 125:1 (p:p), o entre alrededor de 60:1 y alrededor de 125:1 (p:p), o entre alrededor de 80:1 y alrededor de 125:1 (p:p), o entre alrededor de 100:1 y alrededor de 125:1 (p:p). En algunas modalidades, la relación de poliéster a alcóxido es entre alrededor de 20:1 y alrededor de 25:1 (p:p).

TIEMPO DE REACCIÓN

[00128] En la presente se describe un proceso para la transformación de un poliéster en un derivado de éster; donde el proceso comprende mezclar el poliéster con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el poliéster;
- (b) un solvente alcohólico; y
- (c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[00129] En algunas modalidades, la mezcla del poliéster con el solvente para hinchar el poliéster, el alcóxido, y el solvente alcohólico se realiza durante un tiempo suficiente. En algunas modalidades, la mezcla del poliéster con el solvente para hinchar el poliéster, el alcóxido, y el solvente alcohólico se realiza hasta lograr alrededor de 70% de rendimiento del éster deseado. En algunas modalidades, la mezcla del poliéster con el solvente para hinchar el poliéster, el alcóxido, y el solvente alcohólico se realiza hasta lograr alrededor de 75% de rendimiento del éster deseado. En algunas modalidades, la mezcla del poliéster con el solvente para hinchar el poliéster, el alcóxido, y el solvente alcohólico se realiza hasta lograr alrededor de 80% de rendimiento del éster deseado. En algunas modalidades, la mezcla del poliéster con el solvente para hinchar el poliéster, el alcóxido, y el solvente alcohólico se realiza hasta lograr alrededor de 85% de rendimiento del éster deseado. En algunas modalidades, la mezcla del poliéster con el solvente para hinchar el poliéster, el alcóxido, y el solvente alcohólico se realiza hasta lograr alrededor de 90% de rendimiento del éster deseado. En algunas modalidades, la mezcla del poliéster con el solvente para hinchar el poliéster, el alcóxido, y el solvente alcohólico se realiza hasta lograr alrededor de 95% de rendimiento del éster deseado.

[00130] En algunas modalidades, la mezcla del poliéster con el solvente para hinchar el poliéster, el alcóxido, y el solvente alcohólico se realiza durante entre alrededor de 10 mins y 5 hrs, o entre alrededor de 10 mins y 4 hrs, o entre alrededor de 10 mins y 3 hrs, o entre alrededor de 10 mins y 2 hrs, o entre alrededor de 20 mins y 2 hrs, o entre alrededor de 30 mins y 2hrs, o entre alrededor de 40 mins y 2 hrs, o entre alrededor de 30 mins y 1 hr, o entre alrededor de 30 mins y 1,5 hrs. En algunas modalidades, la mezcla del poliéster con el solvente para hinchar el poliéster, el alcóxido, y el solvente alcohólico se realiza durante alrededor de 10 mins, o alrededor de 15 mins, o alrededor de 20 mins, o alrededor de 25 mins, o alrededor de 30 mins, o alrededor de 35 mins, o alrededor de 40 mins, o alrededor de 45 mins, o alrededor de 50 mins, o alrededor de 60 mins, o alrededor de 70 mins, o alrededor de 80 mins, o alrededor de 90 mins, o alrededor de 100 mins, o alrededor de 110 mins, o alrededor de 120 mins, o alrededor de 130 mins, o alrededor de 140 mins, o alrededor de 150 mins, o alrededor de 160 mins, o alrededor de 170 min, o alrededor de 180 mins. En algunas modalidades, la mezcla del poliéster con el solvente para hinchar el

poliéster, el alcóxido, y el solvente alcohólico se realiza durante alrededor de 1 hr, o alrededor de 2 hrs, o alrededor de 3 hrs, alrededor de 4 hrs, o alrededor de 5 hrs.

TEMPERATURA

[00131] En la presente se describe un proceso para la transformación de un poliéster en un derivado de éster; donde el proceso comprende mezclar el poliéster con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el poliéster;
- (b) un solvente alcohólico; y
- (c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[00132] En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza a temperatura ambiente. En algunas modalidades, temperatura ambiente es 25 ± 5 °C.

[00133] En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza sin calor externo. En algunas modalidades, el proceso es exotérmico y la temperatura de la mezcla de reacción aumenta hasta al menos 30 °C, al menos 35 °C, al menos 40 °C, al menos 45 °C, al menos 50 °C, al menos 55 °C, o al menos 60 °C. En algunas modalidades, no se usa ninguna fuente de calor externo para aumentar la temperatura de la mezcla de reacción.

[00134] En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza con calor externo. En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza con calor externo a entre alrededor de 25 °C y alrededor de 100 °C, o entre alrededor de 25 °C y alrededor de 85 °C, o entre alrededor de 25 °C y alrededor de 80 °C, o entre alrededor de 25 °C y alrededor de 60 °C, o entre alrededor de 40 °C y alrededor de 60 °C, o entre alrededor de 40 °C y alrededor de 50 °C, o entre alrededor de 30 °C y alrededor de 50 °C. En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza a alrededor de 26 °C, alrededor de 27 °C, alrededor de 28 °C, alrededor de 29 °C, alrededor de 30 °C, alrededor de 31 °C, alrededor de 32 °C, alrededor de 33 °C, alrededor de 34 °C, alrededor de 35 °C, alrededor de 36 °C, alrededor de 37 °C, alrededor de 38 °C, alrededor de 39 °C, alrededor de 40 °C, alrededor de 41 °C, alrededor de 42 °C, alrededor de 43 °C, alrededor de 44 °C, alrededor de 45 °C, alrededor de 46 °C, alrededor de 47 °C, alrededor de 48 °C, alrededor de 49 °C, alrededor de 50 °C, alrededor de 51 °C, alrededor de 52 °C, alrededor de 53 °C, alrededor de 54 °C, alrededor de 55 °C, alrededor de 56 °C, alrededor de 57 °C, alrededor de 58 °C, alrededor de 59 °C, alrededor de 60 °C, alrededor de 61 °C, alrededor de 62 °C, alrededor de 63 °C, alrededor de 64 °C, alrededor de 65 °C, alrededor de 66 °C, alrededor de 67 °C, alrededor de 68 °C, alrededor de 69 °C, alrededor de 70 °C, alrededor de 71 °C, alrededor de 72 °C, alrededor de 73 °C, alrededor de 74 °C, alrededor de 75 °C, alrededor de 76 °C, alrededor de 77 °C, alrededor de 78 °C, alrededor de 79 °C, alrededor de 80 °C, alrededor de 81 °C,

alrededor de 82 °C, alrededor de 83 °C, alrededor de 84 °C, alrededor de 85 °C, alrededor de 86 °C, alrededor de 87 °C, alrededor de 88 °C, alrededor de 89 °C, alrededor de 90 °C, alrededor de 91 °C, alrededor de 92 °C, alrededor de 93 °C, alrededor de 94 °C, alrededor de 95 °C, alrededor de 96 °C, alrededor de 97 °C, alrededor de 98 °C, alrededor de 99 °C, o alrededor de 100 °C.

PRESIÓN

[00135] En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza a presión atmosférica. En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza a presiones elevadas. En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza a una presión entre presión atmosférica y alrededor de 220 psi, o entre alrededor de presión atmosférica y alrededor de 200 psi, o entre alrededor de presión atmosférica y alrededor de 150 psi, o entre alrededor de presión atmosférica y alrededor de 100 psi, o entre alrededor de presión atmosférica y alrededor de 50 psi, o entre alrededor de 20 y alrededor de 150 psi, o entre alrededor de 50 y alrededor de 100 psi. En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza a alrededor de 14 psi, alrededor de 15 psi, alrededor de 16 psi, alrededor de 17 psi, alrededor de 18 psi, alrededor de 19 psi, alrededor de 20 psi, alrededor de 30 psi, alrededor de 40 psi, alrededor de 50 psi, alrededor de 60 psi, alrededor de 70 psi, alrededor de 80 psi, alrededor de 90 psi, alrededor de 100 psi, alrededor de 110 psi, alrededor de 120 psi, alrededor de 130 psi, alrededor de 140 psi, alrededor de 150 psi, alrededor de 160 psi, alrededor de 170 psi, alrededor de 180 psi, alrededor de 190 psi, alrededor de 200 psi, alrededor de 210 psi, o alrededor de 220 psi.

AGITACIÓN

[00136] En la presente se describe un proceso para la transformación de un poliéster en un derivado de éster; donde el proceso comprende mezclar el poliéster con una mezcla que comprende:

- (a) un solvente para hinchar el poliéster;
- (b) un solvente alcohólico; y
- (c) una cantidad sub-estequiométrica de un alcóxido.

[00137] En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza sin agitación. En algunas modalidades, el proceso descrito en la presente se realiza con mayor agitación. En algunas modalidades, se usa un reactor de lote agitado para proveer agitación. En algunas modalidades, se usa un reactor continuo para proveer agitación.

ALGO DE TERMINOLOGÍA

[00138] Los títulos de las secciones usados en la presente tienen únicamente fines de organización y no debe interpretarse que limitan la materia descrita.

[00139] A menos que se defina de otro modo, todos los términos técnicos y científicos utilizados en la presente tienen el significado según se entiende comúnmente donde pertenece el asunto reivindicado. En el caso de que existan varias definiciones para los términos de la presente, prevalecerán las de esta sección.

[00140] Se debe entender que tanto la descripción general como la descripción detallada son únicamente ejemplos y explicaciones y no restringen ninguna materia reivindicada. En la presente solicitud, el uso de la forma singular incluye el plural a menos que se indique específicamente lo contrario. Cabe destacar que, tal como se usa en la memoria descriptiva y en las reivindicaciones adjuntas, las formas singulares “un”, “una” y “el/la” incluyen referentes plurales a menos que el contexto indique claramente lo contrario. En la presente solicitud, el uso de “o” significa “y/o” a menos que se indique lo contrario. Asimismo, el uso del término “que incluye” así como también otras formas, tales como “incluye” e “incluido”, no es limitativo.

[00141] A menos que el contexto requiera lo contrario, a lo largo de la presente memoria descriptiva y las reivindicaciones, el término “comprender” y sus variaciones, tales como “comprende” y “que comprende” deben interpretarse en un sentido amplio e inclusivo, es decir, como “que incluye, de modo no taxativo”. Además, los encabezados proporcionados en la presente son únicamente a efectos de conveniencia y no interpretan el alcance o significado de la invención reivindicada.

[00142] Como se usan en esta memoria descriptiva y las reivindicaciones adjuntas, las formas en singular “un”, “una” y “el/la” incluyen las referencias en plural a menos que el contexto determine claramente lo contrario. También se observa que el término “o” se emplea por lo general en un sentido que incluye “y/o” salvo que el contenido exprese claramente lo contrario.

[00143] Como se usa en la presente, el término “alrededor de” o “aproximadamente” significan en un margen de 10%, preferentemente de 10% y más preferentemente de 5%, de un valor o un intervalo dados.

[00144] Como se usa en la presente, temperatura ambiente es una expresión coloquial para la temperatura interior preferida o típica (controlada por el clima) a la que las personas están generalmente acostumbradas. Representa el pequeño intervalo de temperaturas a las que el aire no se siente ni frío ni caliente, aproximadamente 21 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 25±5 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 18 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 19 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 20 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 21 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 22 °C. En algunas modalidades, la temperatura

ambiente es 23 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 24 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 25 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 26 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 27 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 28 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 29 °C. En algunas modalidades, la temperatura ambiente es 30 °C.

[00145] Como se usa en esta memoria descriptiva y las reivindicaciones adjuntas, la despolimerización se refiere a un modo de descomponer un polímero a su material de partida. Es esencialmente lo opuesto de la polimerización. En algunas modalidades, la despolimerización se logra por glicólisis, metanólisis o hidrólisis, categorizada por el reactivo de despolimerización usado, como glicol, metanol o agua, respectivamente.

[00146] La definición de expresiones químicas estándares se puede encontrar en las obras de referencia, que incluyen, de modo no taxativo, Carey y Sundberg, «Advanced Organic Chemistry. 4ª Ed.» Tomos A (2000) y B (2001), Plenum Press, Nueva York.

[00147] Los términos a continuación, como se usa en la presente, tienen los siguientes significados, a menos que se indique de otro modo:

[00148] “Alquilo” se refiere a un radical de cadena de hidrocarburo recta o ramificada que se une al resto de la molécula por enlace simple. Un alquilo lineal que comprende hasta 4 átomos de carbono se denomina alquilo C₁-C₄ lineal, del mismo modo, por ejemplo, un alquilo lineal que comprende hasta 3 átomos de carbono es un alquilo C₁-C₃ lineal. Los grupos alquilo lineal incluyen alquilo C₁-C₄ lineal, alquilo C₁-C₃ lineal, alquilo C₁-C₂ lineal, alquilo C₂-C₃ lineal y alquilo C₂-C₄ lineal. Los grupos alquilo representativos incluyen metilo, etilo, propilo y butilo. Un alquilo ramificado que comprende entre 3 y 4 átomos de carbono se denomina alquilo C₃-C₄ ramificado. Grupos alquilo ramificados representativos incluyen, de modo no taxativo, t-butilo, sec-butilo, isobutilo e isopropilo. A menos que se especifique de otro modo en la memoria descriptiva, un alquilo está opcionalmente sustituido con oxo, halógeno, -CN, -CF₃, -OH, -OMe, -NH₂, o -NO₂. En algunas modalidades, un alquilo está opcionalmente sustituido con oxo, halógeno, -CN, -CF₃, -OH, u -OMe. En algunas modalidades, el alquilo está opcionalmente sustituido con halógeno.

[00149] “Halo” o “halógeno” se refieren a bromo, cloro, fluoro o yodo. En otras modalidades, halógeno es fluoro o cloro. En algunas modalidades, halógeno es fluoro.

[00150] “Haloalquilo” se refiere a un radical alquilo, como se define anteriormente, que está sustituido por uno o más átomos de halo, como se define anteriormente, p. ej., trifluorometilo, difluorometilo, fluorometilo, triclorometilo, 2,2,2-trifluoroetilo, 1,2-difluoroetilo, 3-bromo-2-fluoropropilo, 1,2-dibromoetilo, y similares.

[00151] “Hidroxialquilo” se refiere a un radical alquilo, como se define anteriormente, que está sustituido por uno o más grupos -OH, *p. ej.*, hidroximetilo, hidroxietilo, hidroxipropilo, propanodiol, y similares.

[00152] “Cicloalquilo” se refiere a un anillo carbocíclico, monocíclico o policíclico, estable, parcial o completamente saturado, que puede incluir sistemas de anillos fusionados o puenteados. Cicloalquilos representativos incluyen, de modo no taxativo, cicloalquilos que tiene de tres a quince átomos de carbono (cicloalquilo C₃-C₁₅), de tres a diez átomos de carbono (cicloalquilo C₃-C₁₀), de tres a ocho átomos de carbono (cicloalquilo C₃-C₈), de tres a seis átomos de carbono (cicloalquilo C₃-C₆), de tres a cinco átomos de carbono (cicloalquilo C₃-C₅), o tres a cuatro átomos de carbono (cicloalquilo C₃-C₄). En algunas modalidades, el cicloalquilo es un cicloalquilo de 3 a 6 miembros. En algunas modalidades, el cicloalquilo es un cicloalquilo de 5 a 6 miembros. Los cicloalquilos monocíclicos incluyen, por ejemplo, ciclopropilo, ciclobutilo, ciclopentilo, ciclohexilo, cicloheptilo y ciclooctilo. Cicloalquilos policíclicos o carbociclos incluyen, por ejemplo, adamantilo, norbornilo, decalinilo, biciclo[3.3.0]octano, biciclo[4.3.0]nonano, cis-decalina, trans-decalina, biciclo[2.1.1]hexano, biciclo[2.2.1]heptano, biciclo[2.2.2]octano, biciclo[3.2.2]nonano, y biciclo[3.3.2]decano, y 7,7-dimetil-biciclo[2.2.1]heptanilo. Cicloalquilos parcialmente saturados incluyen, por ejemplo, ciclopentenilo, ciclohexenilo, cicloheptenilo, y ciclooctenilo. A menos que se especifique de otro modo en la memoria descriptiva, un cicloalquilo está opcionalmente sustituido con oxo, halógeno, metilo, etilo, -CN, -CF₃, -OH, -OMe, -NH₂, o -NO₂. En algunas modalidades, un cicloalquilo está opcionalmente sustituido con oxo, halógeno, metilo, etilo, -CN, -CF₃, -OH, u -OMe. En algunas modalidades, el cicloalquilo está opcionalmente sustituido con halógeno.

[00153] “Arilo” se refiere a un radical derivado de un sistema de anillos de hidrocarburos que comprende hidrógeno, de 6 a 30 átomos de carbono y al menos un anillo aromático. El radical arilo puede ser un sistema de anillos monocíclico, bicíclico, tricíclico o tetracíclico, que puede incluir sistemas de anillos fusionados o puenteados. En algunas modalidades, el arilo es un arilo de 6 a 10 miembros. En algunas modalidades, el arilo es un arilo de 6 miembros. Los radicales de arilo incluyen, de modo no taxativo, radicales arilo derivados de sistemas de anillos de hidrocarburo de antrileno, naftileno, fenantrileno, antraceno, azuleno, benceno, criseno, fluoranteno, fluoreno, as-indaceno, s-indaceno, indano, indeno, naftaleno, fenaleno, fenantreno, pleiadenio, pireno y trifenileno. En algunas modalidades, el arilo es fenilo. A menos que se especifique de otro modo en la memoria descriptiva, un arilo puede estar opcionalmente sustituido, por ejemplo, con halógeno, amino, nitrilo, nitro, hidroxilo, alquilo, alquenilo, alquinilo, haloalquilo, alcoxi, arilo, cicloalquilo, heterocicloalquilo, heteroarilo, y similares. En algunas modalidades, un arilo está opcionalmente sustituido con halógeno, metilo, etilo, -CN, -

CF₃, -OH, -OMe, -NH₂, o -NO₂. En algunas modalidades, un arilo está opcionalmente sustituido con halógeno, metilo, etilo, -CN, -CF₃, -OH, u -OMe. En algunas modalidades, el arilo está opcionalmente sustituido con halógeno.

[00154] Como se usa en la presente, el término “mol” al referirse a PET es la cantidad molar y se calcula usando el peso molecular de la unidad “PET” que es 192,17 g/mol.

EJEMPLOS

[00155] Los siguientes ejemplos pretenden ilustrar de modo no taxativo las modalidades descritas.

Ejemplo 1:

[00156] Se introdujo polietileno tereftalato (1000g) en un reactor. Se agregó diclorometano (500g) y la mezcla se agitó a temperatura ambiente y a presión atmosférica durante alrededor de 40 mins. Se agregó luego metóxido de sodio y metanol a la mezcla de reacción se agitó y calentó durante 120 mins (véase la tabla a continuación por detalles de cantidades, tiempo y temperatura).

[00157] La mezcla de reacción se filtró luego y la torta de filtrado se lavó con metanol. La torta de filtrado se fundió luego y se filtró a 140 °C para retirar cualquier material sin reaccionar. El dimetil tereftalato filtrado se destiló luego al vacío a 200 °C. El líquido recuperado de la filtración se destiló para recuperar los solventes y el mono etilenglicol.

Ej.	Peso de metanol (g)	Peso de metóxido de sodio (g)	Tiempo de reacción (min)	Temperatura de reacción (°C)	Rendimiento (%)
1A	667	32	120	55	90
1B	600	54	120	50	90
1C	580	50	120	60	90

Ejemplo 2:

[00158] Se introdujo polietileno tereftalato (1000g) en un reactor. Se agregó DMSO (500g) y la mezcla se agitó a temperatura ambiente y a presión atmosférica durante alrededor de 40 mins. Luego se agregó metóxido de sodio (45g) y metanol (550g) a la mezcla de reacción se agitó y calentó a 55 °C durante 120 mins.

[00159] La mezcla de reacción se filtró luego y la torta de filtrado se lavó con metanol. La torta de filtrado se fundió luego y se filtró a 140 °C para retirar cualquier material sin reaccionar. El dimetil tereftalato filtrado se destiló luego al vacío a 200 °C. El líquido recuperado de la filtración se destiló para recuperar los solventes y el mono etilenglicol.

[00160] Se obtuvo dimetil tereftalato en 89% de rendimiento.

Ejemplo 3:

[00161] PET (10000g) se trató con metanol (6000g) a 60°C durante una hora. Luego se drenó el metanol. Luego del drenaje, el reactor se calentó hasta de 60°C a 70°C y se agregó metóxido de sodio (a 25% en peso en metanol). Treinta minutos luego de la adición de metóxido de sodio, se agregó el balance de metanol. La reacción se detuvo 3 hrs luego de la adición de metóxido de sodio. La mezcla de reacción se enfrió a temperatura ambiente y luego se filtró para separar MEG, metóxido de sodio y metanol residual de DMT y material sin reaccionar. La filtración funcionó para los ensayos 3 a 5 mientras que los ensayos 1 y 2 no se pudieron filtrar incluso usando diferentes métodos de separación de sólido y líquido (centrifugación, filtro de prensa, filtro al vacío o filtro de presión). Debido a que no fue posible la filtración, la destilación del metanol seguido por destilación de MEG y luego destilación de DMT de la mezcla de reacción se intentó en un evaporador giratorio. Luego de la recuperación del metanol la mezcla de reacción se volvió una pasta y no fue posible la destilación de MEG y DMT debido a reacciones secundarias con contaminantes.

[00162] Para ensayos 3 y 5, luego de separación de sólido-líquido. El metanol residual y MEG se recuperaron de la fase líquida en dos fracciones diferentes usando un evaporador giratorio. DMT se recuperó exitosamente de la fase sólida usando un evaporador de película fina.

[00163] La tabla a continuación muestra la recuperación de DMT y MEG con diferentes cantidades de metóxido de sodio.

Ensayo	NaOMe (g)	Relación PET: NaOMe (p/p)	Recuperación de DMT puro ¹	Recuperación de MEG puro ²
1	2000	5:1	No ³	No ³
2	1000	10:1	No ³	No ³
3	500	20:1	Sí ⁴	Sí ⁴
4	300	33:1	Sí ⁴	Sí ⁴
5	200	50:1	Sí ⁴	Sí ⁴

¹ dimetil tereftalato

² mono etilenglicol

³ La suspensión se calentó para intentar la evaporación de DMT y MEG pero no fue posible debido a la generación de productos mezclados con todos los contaminantes.

⁴ DMT puro se recuperó de la torta que estaba libre de MEG y catalizador. MEG puro se recuperó del licor madre y los lavados que contenían menos de 1% DMT.