

Opteon™ 1100

Agente Expansor para Espumas de Poliuretano de Baixo GWP

Inaise Balestero, Ernest B. Wysong, Ph.D.
The Chemours Company

The information set forth herein is furnished free of charge and based on technical data that Chemours believes to be reliable. It is intended for use by persons having technical skill, at their own risk. Since conditions of use are outside our control, we make no warranties, expressed or implied and assume no liability in connection with any use of this information. Nothing herein is to be taken as a license to operate under, or a recommendation to infringe any patents or patent applications.

Nós somos Chemours

Nós utilizamos o poder da química, trabalhando lado a lado com nossos clientes



Fluorprodutos

Tecnologias
de Titânio

Soluções
Químicas

- Formada a partir dos negócios de Químicos de Performance da DuPont
- Mais de 2 séculos de experiência na indústria química nos torna uma start-up de 200 anos
- Uma rica história de inovação e lançamentos
- Líder de mercado em segurança e responsabilidade no manuseio de produtos químicos

Líder de Mercado

Em produção e manuseio seguro de produtos químicos. Combinando produtos líderes de mercado e *expertise* em aplicações no setor químico.

#1

Líder de mercado em Fluorprodutos

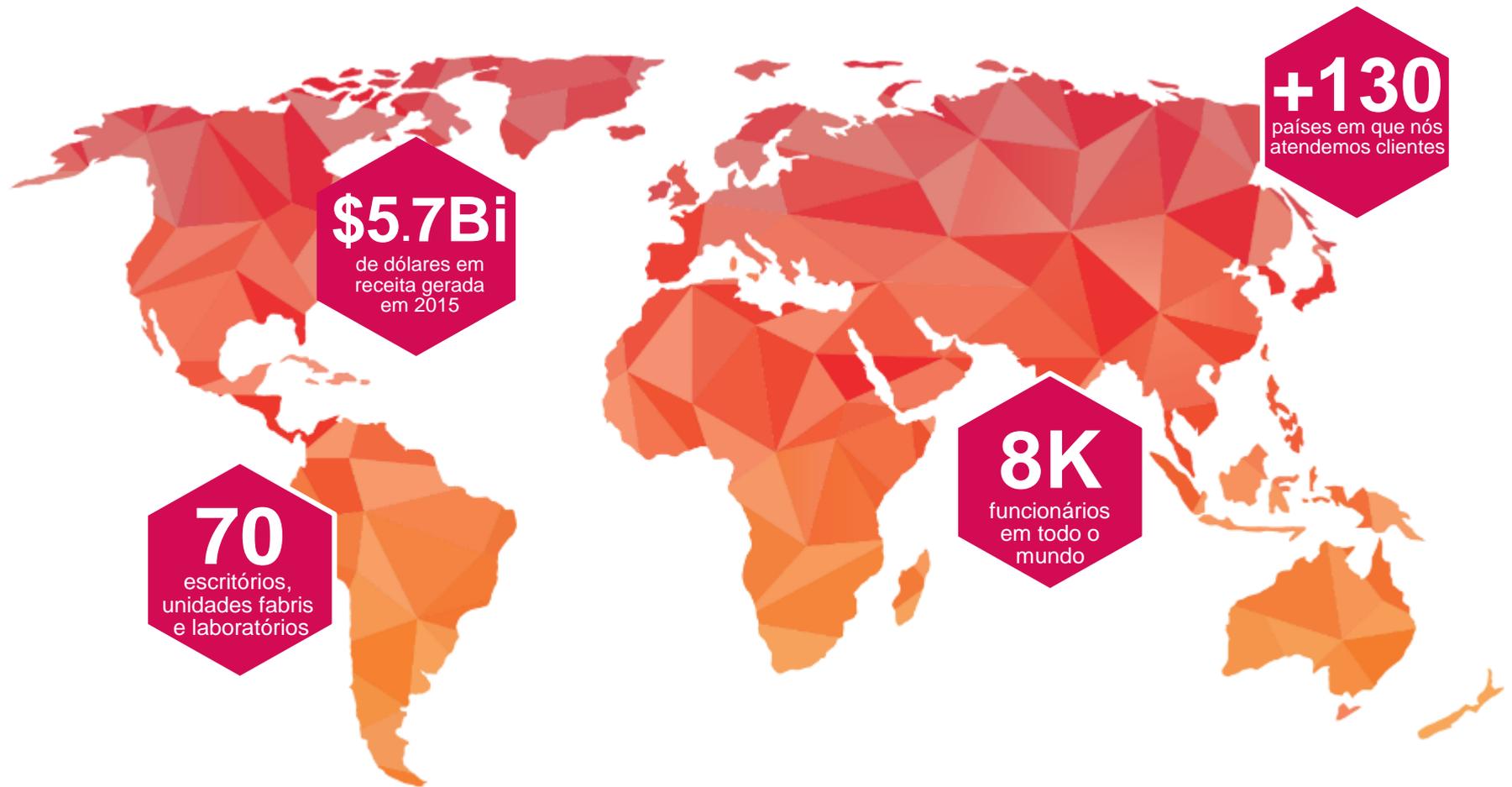
#1

Fabricante de Dióxido de Titânio

#1

Líder no mercado de mineração

Nosso alcance global



Nossa presença global

Pioneirismo nos investimentos em HFO



- ✓ 1ª a investir
- ✓ 2018: triplicar a capacidade
- ✓ Maior portfólio
- ✓ Maior fabricante do mundo



Chemours construirá maior fábrica de HFO do mundo

Postado por Repórter do Frio | 19 maio 2016 | Negócios | ★★★★★

✓ Curtir Compartilhar Você, Silvio Mantano e outras 642 pessoas curtiram isso.



A nova planta da Chemours (antiga DuPont Refrigerantes), prevista para entrar em funcionamento no terceiro trimestre de 2018, em Ingleside, no Texas, deve triplicar sua capacidade de produção da linha Opteon, composta por refrigerantes à base de hidrofluorolefinas (HFOs).

Segundo o comunicado distribuído à imprensa, a unidade utilizará um processo inovador e patenteado para fabricar o Opteon YF (R-1234yf), substância sucessora dos hidrofluorcarbonos (HFCs) que pode ser usada em ar-condicionado automotivo e em composições de fluidos para outras aplicações.

"Os produtos Opteon foram desenvolvidos em resposta às regulamentações ambientais cada vez mais rigorosas e, na maioria dos casos, eles apresentam melhor desempenho do que os refrigerantes que eles substituem", informa Mark Vergnano, presidente e CEO da companhia.

Nossa presença global

Planta de Opteon™ 1100 já em operação em Changshu, China, para atender a demanda global



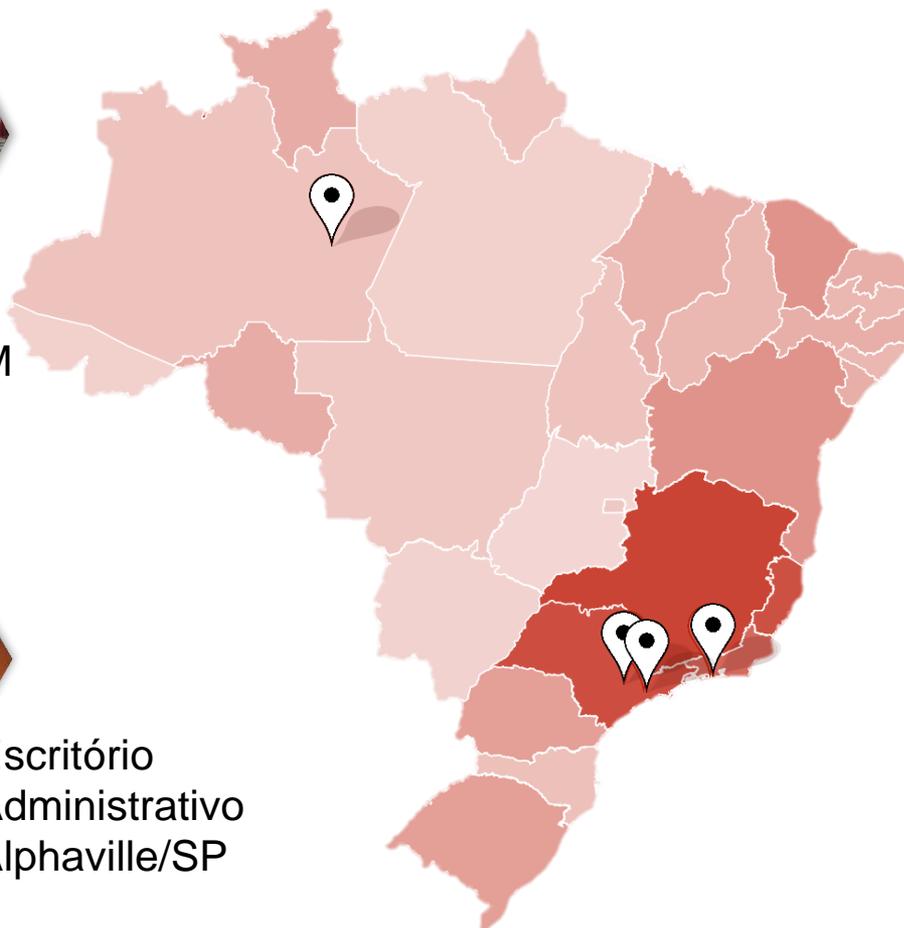
Nossa presença local



Planta de Manaus/AM



Planta de Barra Mansa/RJ

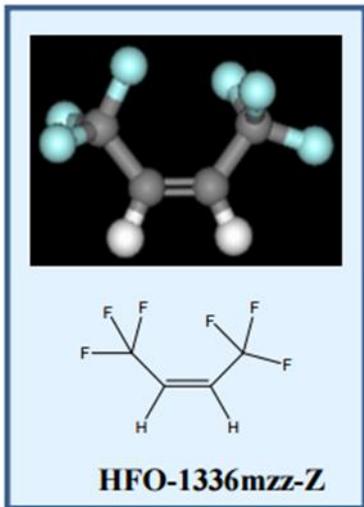


Escritório
Administrativo
Alphaville/SP



Centro de Distribuição
Guarulhos/SP

Opteon™ 1100: a nova geração de agentes expansores de espuma



- ✓ Peso molecular 164 g/mol
- ✓ Potencial de Degradação do Ozônio (ODP): 0 Sem Cloro
- ✓ Potencial de Aquecimento Global (GWP): 2 (IPCC AR 5)
- ✓ Tempo de vida na Atmosfera: 22 dias (NOAA)
- ✓ **MIR Compostos orgânicos Voláteis** (0.04 g O₃/g – Não VOC)
- ✓ **Não Flamabilidade** (ASTM E 681 a 60 °C & 100 °C)
- ✓ Ponto de Ebulição: 33 °C
- ✓ Condutividade Térmica de Vapor **k = 10.7** mW/mK a 25 °C
- ✓ Limite de Exposição 500 ppm (8h) WEEL
- ✓ Densidade Líquida 1.38 g/ml @ 21°C

Opteon™ 1100: a nova geração de agentes expansores de espuma

Principais atributos

- Ponto de Ebulição (33 °C)
- Estabilidade química
- Performance de Isolamento
- Baixa difusão

Principais aplicações:

- Spray (SPF)
- Appliance (linha branca)
- Tubulações
- Blocos e painéis
- Pele integral



Comparação de Agentes Expansores

Agente Expansor	ODP	GWP	Ponto de Ebulição (°C)	Lambda @ 25 °C (mW/m K)	Flamabilidade
Opteon™ 1100	0	2	33	10.7	Não
HCFC-141b	0.11	782 ^a	31	9.7	Não
HFC-245fa	0	858 ^a	15	12.7	Não
HFC-365mfc	0	804 ^a	40	10.6	Sim
HCFO-1233zd	~0 ^c	1	19.5	10.5	Não
Methylal	0	< 3	42	14.5	Sim
Formiato de Metila (Ecomate)	0	< 25	32	15.8 ^b	Sim
Ciclopentano	0	11	49	13	Sim

a: (100-yr ITH) AR 5

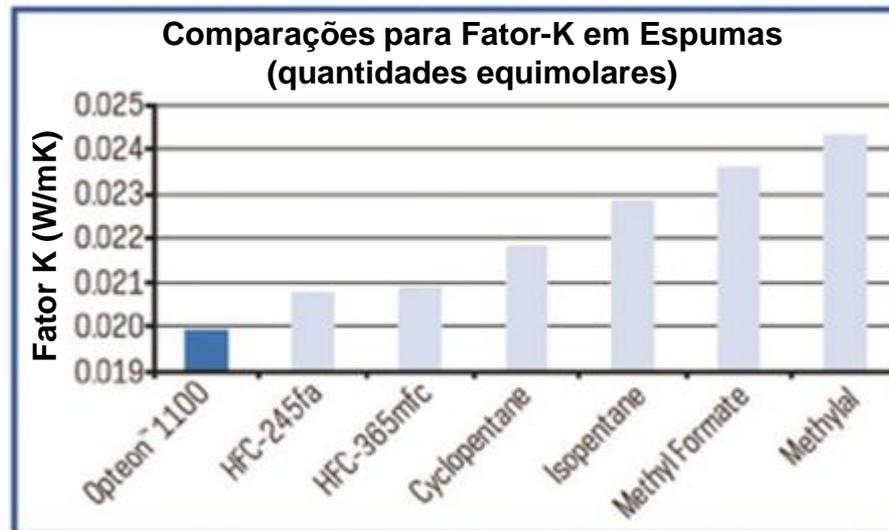
b: *Extrapolated from literature data(17.7 mW @ 100 °C)*

c: No impact on ozone layer depletion and is commonly referred to as zero

Alto desempenho em Isolamento Térmico

Alternativa com melhor desempenho em isolamento

Melhor fator K (isolamento térmico) em comparação com hidrocarbonetos e outros fluorocarbonos utilizados como agentes expansores;

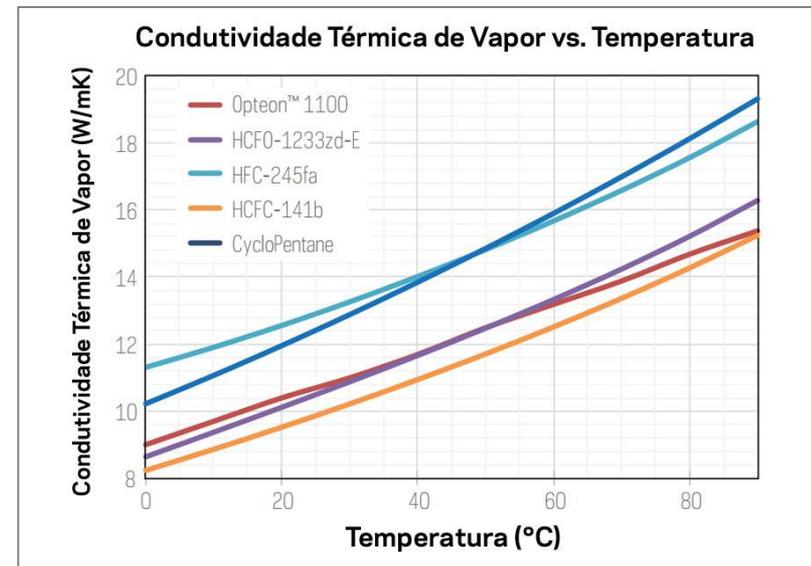
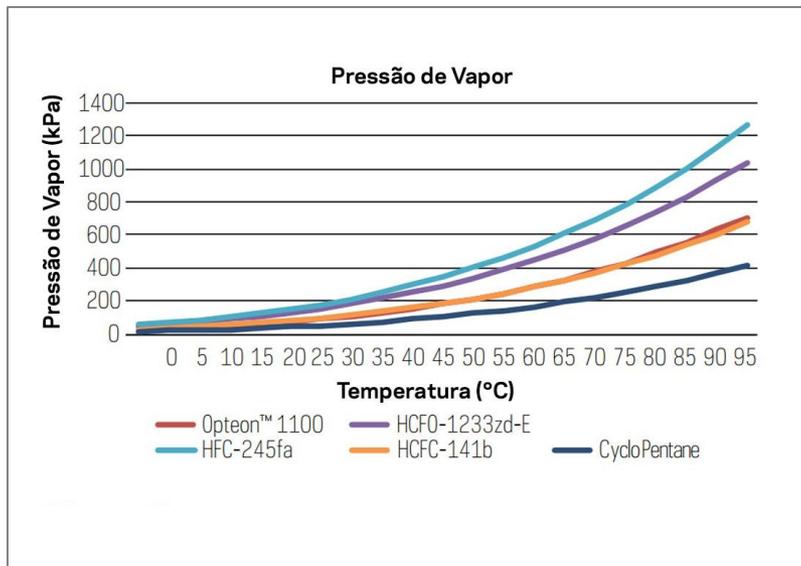


Alto desempenho em Isolamento Térmico

Curvas de Pressão/Temperatura e Condutividade

Desempenho muito próximo ao HCFC-141b;

Substituição direta com excelente performance.



Opteon™ 1100: Comparação com HCFOs

Principais diferenças

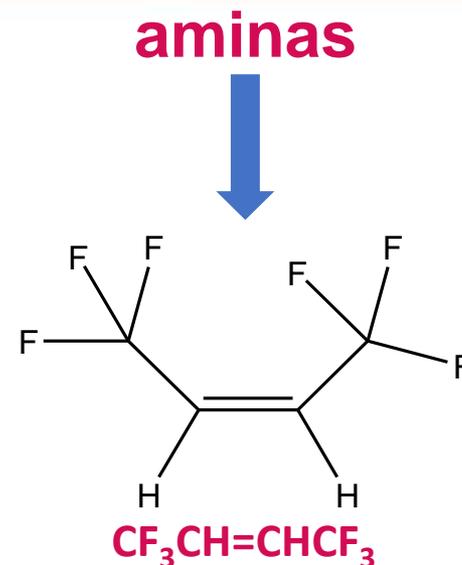
- ✓ Estabilidade
- ✓ Solubilidade
- ✓ Difusão

A ligação dupla não sofre reação de adição.

Portanto, **não se produz HF**

Não há desativação dos **catalisadores**

Não há ataque a surfactantes de **silicone**



**Estabilidad después de 24h @ 54 °C
(ppm F⁻ detectado)**

Agente Expansor	Catalisador A	Catalisador B	Catalisador C
Opteon™ 1100	6	9	1
Outras Olefinas halogenadas	200-450 ¹	400-3000 ¹	1500-7000 ¹



Catalyst A: Glycine, N-[(2-hydroxy-5-nonylphenyl)methyl]-N-methyl-, sodium salt (1:1)

Catalyst B: N,N,N',N',N'' – Pentamethyl-diethylenetriamine

Catalyst C: Phenol, 2,4,6-tris[(dimethylamino)methyl]- / Phenol, bis[(dimethylamino)methyl]- 1- WO 2012/115929 A2

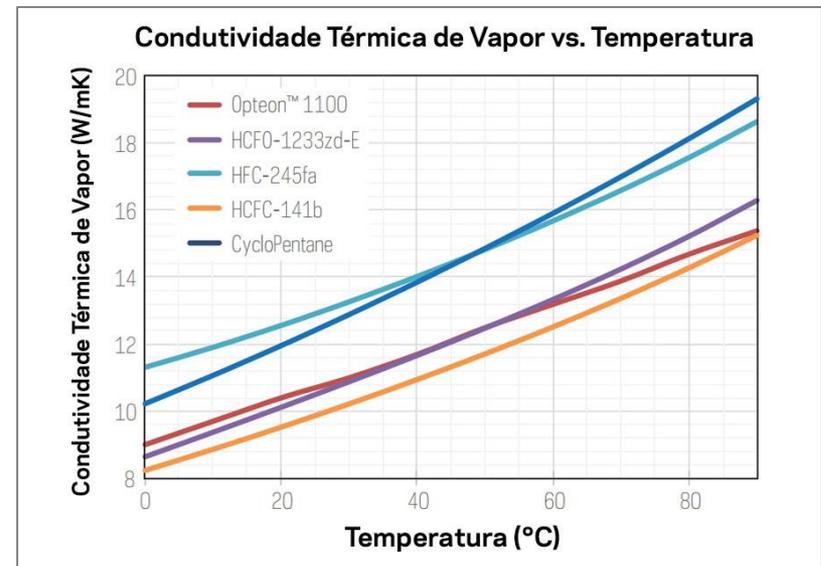
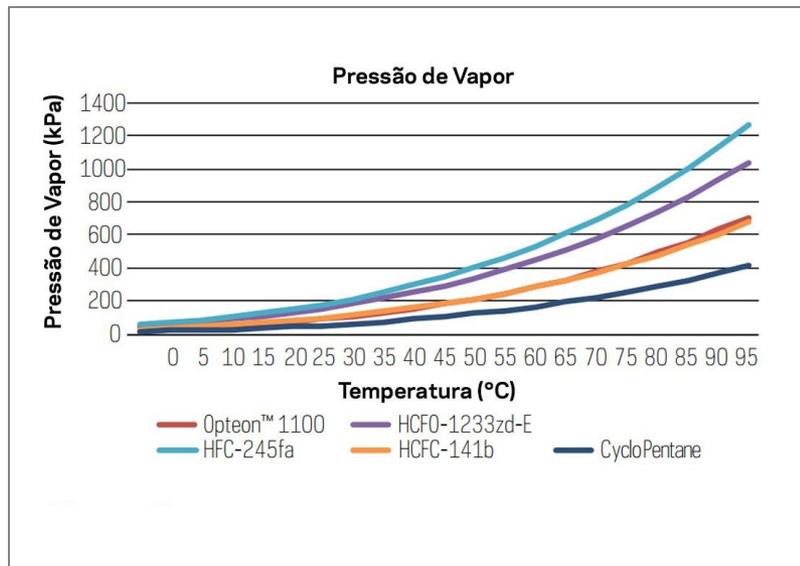


Alto desempenho em Isolamento Térmico

Curvas de Pressão/Temperatura e Condutividade

Desempenho muito próximo ao HCFC-141b;

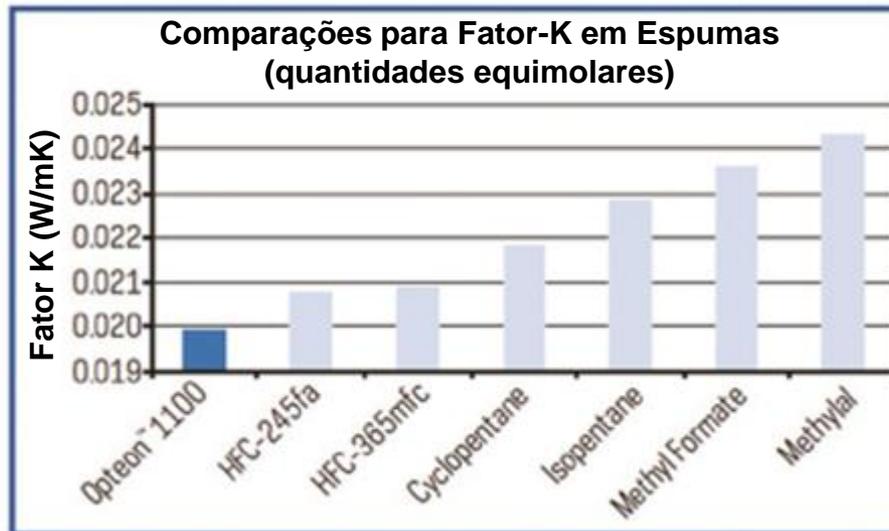
Substituição direta com excelente performance.



Alto desempenho em Isolamento Térmico

Alternativa com melhor desempenho em isolamento

Melhor fator K (isolamento térmico) em comparação com hidrocarbonetos e outros fluorocarbonos utilizados como agentes expansores;



Segurança no armazenamento e manuseio

Baixa Toxicidade

- ✓ Não Irritante;
- ✓ Não Inflamável;
- ✓ Sem Compostos Orgânicos Voláteis – VOC.



Agente Expansor de Espuma	MIR (g O ₃ /g)
HFO-1336mzz-Z	0.04
Formiato de Metila	0.06
HFO-1234ze	0.1
HFO-1234yf	0.28
n-Pentano	1.31
Isopentano	1.45
Ciclopentano	2.39
Etano	0.28

Teste de Toxicidade	Resultados
ALC e LC-50	Toxicidade aguda muito baixa
Irritação na Pele	Não irritante
Mutagenicidade	Não mutagênico
Aberração Cromossômica	Nenhum dano material genético quando testado em culturas de células de mamíferos
Sensibilização Cardíaca	Perfil favorável de potencial sensibilização cardíaca
Inalação Repetida (28 dias)	Perfil favorável de inalação repetida
Inalação Repetida (90 dias)	Perfil favorável de inalação repetida consistente com o teste de 28 dias
Toxicidade no Desenvolvimento	Nenhuma evidência no desenvolvimento do feto
Toxicidade Reprodutiva	Nenhuma evidência de toxicidade reprodutiva

Baixo Custo de Conversão

Não são necessários investimentos em:

- ✓ Tanques de classificação de pressão, tubulações ou contêiners para armazenamento/transporte;
- ✓ Mudanças nos materiais de construção;
- ✓ Investimentos devido a inflamabilidade ou em equipamentos para proteção contra explosão.



Alto desempenho em Isolamento Térmico

Demonstração no Cliente

O alto ponto de ebulição, alto isolamento e baixo coeficiente de difusão permitem substituições de mesmo peso com ajustes de densidade com água

Spray de Espuma

Substituição de mesmo peso, melhor isolamento

pbw baseado em 100 pbw de Polioliol	HCFC-141b	Opteon™ 1100	HFC-245fa	Opteon™ 1100
Agente Expansor de Espuma	19.0	19.0	9.0	9.0
H ₂ O	0.3	0.3	1.8	1.8
Densidade da Espuma (kg/m ³)	43.4	38.5	44.2	45.6
Fator K Inicial em 23°C (mW/mK)	20.1	19.3	23.0	22.6
Fator K Relativo	Controle	-4%	Controle	-2%
Células Fechadas %	93%	94%	98%	99%
Peso Molecular	117	164	134	164
Redução Equimolar de Opteon™ 1100	Controle	-29%	Controle	-18%

Alto desempenho em Isolamento Térmico

Demonstração no Cliente

O alto ponto de ebulição, alto isolamento e baixo coeficiente de difusão permitem substituições de mesmo peso com ajustes de densidade com água

Painel de Espuma

Substituição de mesmo peso, melhor isolamento.

pbw baseado em 100 pbw de Polioli	HCFC-141b	HFC-245fa	HFC-365mfc	Opteon™ 1100
Densidade de Espuma (kg/m ³)	40.1	40.3	40.2	39.8
Densidade do Núcleo (kg/m ³)	37.6	39.0	38.7	38.4
Fator K em 23°C (mW/mK) – inicial	20.5	20.8	21.2	19.9
Fator K Relativo VS HCFC-141b - inicial	Controle	1%	3%	-3%
Fator K em 23°C (mW/mK) - 28 dias	23.1	22.3	22.9	21.3
Fator K Relativo VS HCFC-141b – 28 dias	Controle	-3%	-1%	-8%
Célula Fechada %	0.9	0.9	0.9	0.9
Peso Molecular	117	134	148	164
Redução Equimolar de Opteon™ 1100	Controle	-14%	-26%	-40%

Excelente estabilidade química no sistema

Em sistemas de polioli, sem problemas de reatividade ou densidade

Opteon™ 1100 – Estabilidade em Sistemas de Poliéter

Dias com 50°C em estufa	Relação (Aderência/ Tempo de Creme)	Densidade da Espuma (Kg/m ³)
0	3.6	33.6
4	4.5	35.2
21	5.2	35.2
53	4.3	38.4
89	3.0	38.4
122	4.4	38.4
150	3.6	35.2
187	3.6	30.4

Opteon™ 1100 – Estabilidade em Sistemas de Poliéster

Dias com 50 °C em estufa	Relação (Aderência/ Tempo de Creme))	Densidade da Espuma (Kg/m ³)
0	3.6	40.0
15	3.7	38.4
47	6.5	36.8
83	5.4	41.7
116	4.4	35.2
144	3.3	38.4
181	3.3	35.2



Excelente estabilidade química no sistema

Objetivo: a solubilidade de Opteon™ 1100 em diversos poliois

Resultado: É demonstrada boa solubilidade em uma ampla gama de poliois

Polyol Type	OH# (mg KOH/g)	Opteon™ 1100 Limite de Solubilidade (Peso %)	
		21°C	50°C
Poliéteres			
Amina	391-800	5-50	40-50
Sucrose/amina	400-499	50	50
Sucrose/Glicol	440	50	50
Sucrose/Glicerina	280-520	50	50
Sorbitol	490	50	50
Mannich-Base	300-470	5-50	29-50
Poliésteres	240-307	5-30	25-35

Excelente estabilidade química na espuma

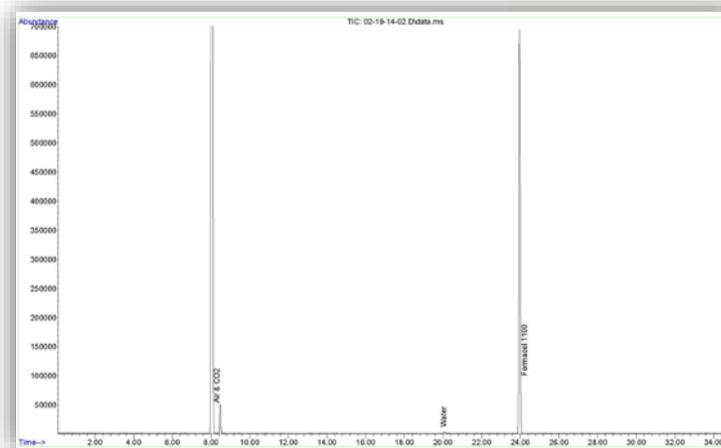
4 meses em estufa a 60° C

Sem reatividade

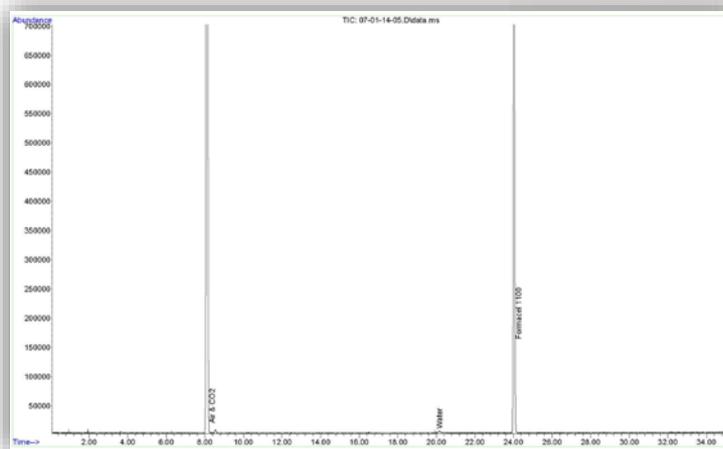
Sem degradação

Formulação do lado-B	Peso% (pbw)
Poliol à base de Sacarose	45
Poliol à base de Amina (TDA)	35
Poliéster Aromático	20
Silicone Tipo Surfactante	2.7
Catalisadores à base de Amina	3.9
Opteon™ 1100	40.2
Água	1.4
Isocianato	142
Índice de Espuma	1.2

Células de Gás de Espuma (GC) antes do armazenamento a 60°C



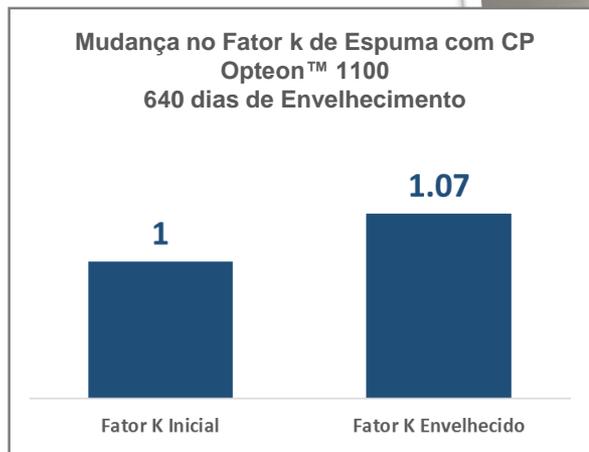
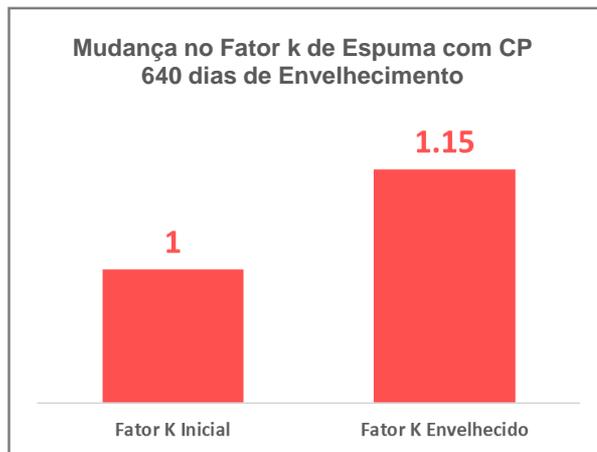
Células de Gás de Espuma (GC) após 4 meses de armazenamento a 60°C



Boa estabilidade no Envelhecimento

Teste em Refrigeradores

- ✓ Excelente Retenção do agente expansor;
- ✓ Estabilidade química da formulação;
- ✓ Compatibilidade com ABS nas misturas com CP mesmo após envelhecimento;



Boa estabilidade no Envelhecimento

Teste em Espuma de Spray

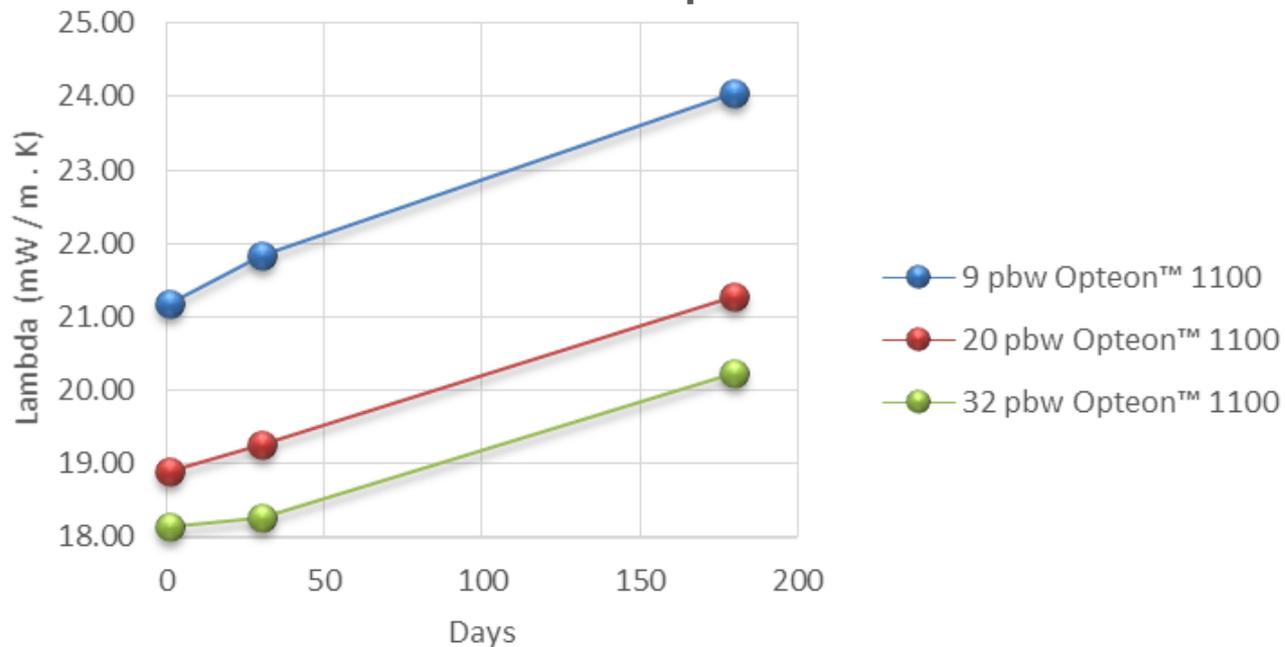
Desempenho superior de isolamento após o envelhecimento

Menor perda de fator k no tempo, passando a apresentar performance melhor que o 141b após 4 anos

Envelhecimento do Fator K após 5 anos (32 kg/m ³ Espuma em Spray)		
	HCFC-141b	Opteon™ 1100
Inicial	18.5 mW/mK	18.6 mW/mK
4 anos (23C)	26.9 mW/mK	24.3 mW/mK
5 anos (23C)	27.1 mW/mK	24.6 mW/mK

Estabilidade no Envelhecimento

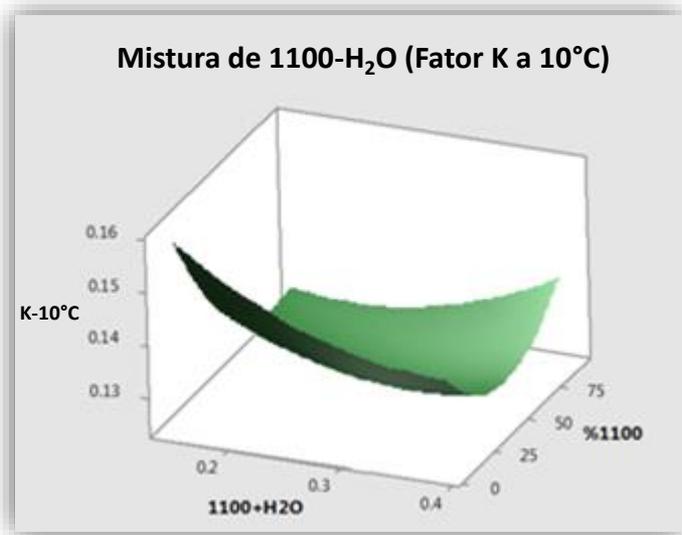
**Condutividade Térmica no Envelhecimento
em Diferentes Concentrações
Amostras envelhecidas por 6 meses a 25°C**



Otimização de Opteon™ 1100 em mistura com água

Otimizações Opteon™ 1100 podem ser feitas com H₂O ou HCs

Melhoria de desempenho da espuma com menor uso do produto.



Formulação	75 moles % Opteon™ 1100	54 moles % Opteon™ 1100
Polióis e Aditivos (pbw)	100	100
Água (pbw)	1.3	2.8
Opteon™ 1100 (pbw)	36.8	29.9
Propriedades de Espuma		
Densidade (kg/m ³)	31.7	29.4
Fator K (mW/mK) em 24 °C	19.3	19.3
Fator K (mW/mK) em 1.7°C	18.6	17.6
Mudanças Relativas no Fator K		
Fator K (mW/mK) em 24 °C	Controle	0.0%
Fator K (mW/mK) em 1.7 °C	Controle	-5.4%
Fator K médio (mW/mK)	Controle	-2.6%
Mudanças Relativas nos Agentes		
Opteon™ 1100 (pbw)	Controle	-19%

Compatibilidade com metais

Metais em Opteon™ 1100 líquido à 100°C por 2 semanas

Amostra Metálica	Peso da Amostra	Aparência da Amostra	Aparência da Solução FEA	Análise da Solução FEA
Aço Inoxidável	Sem mudanças no peso	Sem sinal de corrosão	Límpida	Sem detecção de fluoreto **
Aço Carbono	Sem mudanças no peso	Sem sinal de corrosão	Límpida	Sem detecção de fluoreto **
Cobre	Sem mudanças no peso	Sem sinal de corrosão	Límpida	Sem detecção de fluoreto **
Bronze	Sem mudanças no peso	Sem sinal de corrosão	Límpida	Sem detecção de fluoreto **
Alumínio	Sem mudanças no peso	Sem sinal de corrosão	Límpida	Sem detecção de fluoreto **

** Limite de detecção = 0.5 ppm

Loh et al. "Development Program Update for Low GWP Foam Expansion Agent", Proceedings of 2009 Polyurethane Technical Conference, National Harbor MD, USA

Considerações para Otimização

Como obter o máximo da formulação com Opteon™ 1100 e mantê-lo?

- Maximizar proporção de água
- Minimizar tamanho de célula
- Minimizar perdas físicas do agente expensor
 - Aplicação
 - Envelhecimento
- Maximizar expansão com a menor quantidade de agente

Considerações para Otimização

Maximizar expansão com a menor quantidade de agente:

- Condições de aplicação:
 - Temperaturas dos lados A&B
 - Concentração de catalisadores
 - Viscosidade do polioliol/isocianato
 - Tipos de surfactantese concentrações
 - Concentração de aditivos
 - Quantidade de água de acordo com o tipo e concentração de catalisador.

Considerações para Otimização

Como minimizar tamanho de célula?

Em geral, menores células levam a melhor fator-k

- **Surfactantes** (tipo, concentração, misturas)
- Concentração de **catalisador** e taxa de reação
- **Solubilidade** do agente expander no lado A & B
- Aditivos para nucleação e prevenção de coalescência

Run 8: 0.5 pbw Surfactant
2.1 pbw Gel Catalyst

Avg Size: 364 micron

Run 1: 2.0 pbw Surfactant
2.9 pbw Gel Catalyst

Avg Size: 257 micron

Teste	Tempo de Crescimento seg.	Tempo de Gel seg.	Lambda (Inicial) a 24°C	Lambda (1 Mês) a 24°C	Lambda (8 Meses) a 24°C	Densidade (PCF)	Célula Fechada (%)
8	21.9	13.6	20.44	21.53	25.06	2.44	92.10
1	17.5	11	18.90	19.25	22.13	2.21	93.06

Recomendações de Surfactantes

Air Products

Espuma Spray: Dabco SI-3501, SI-3101

Solubilidade: Dabco PM 301

Evonik

Espuma Spray: Tegostab B 84715

Linha Branca: Tegostab B 8465, B 8491

Momentive

Espuma Spray: Niox Y-16130, Niox L-6643, Niox L-6705

Linha branca: L-6952, L-6884, and Y-16300

Solubilidade/Compatibilidade: L-6884, L-6889, L-6891

Siltech:

Silstabs 2450 and 2580

Resumo

Opteon™ 1100 é o melhor custo-benefício para melhorar desempenho e eficiência energética

- Opteon™ 1100 é uma molécula HFO, a nova geração de agentes expansores **líquido, não inflamável**, para aplicações em uma ampla gama de aplicações como **isolamento e pele integral**;
- Versátil, compatível para misturas com outros agentes expansores, oferecendo possibilidades para melhoria de performance e maior custo-benefício;
- Excelente **estabilidade**, que permite formulações utilizando as matérias primas atuais;
- **Disponibilidade comercial** já a partir do segundo semestre de 2017.



Estamos à disposição para discutirmos possibilidades.

Inaise Balestero

Desenvolvimento de Mercado

inaise.balestero@chemours.com

www.opteon.com

A informação aqui contida é gratuita e baseada em dados técnicos que a Chemours acredita serem confiáveis. É pretendido ser utilizado por pessoas com conhecimento técnico, sob seu próprio discernimento e risco. Devido ao fato das condições de uso estarem fora de nosso controle, não fazemos garantias, expressas ou implícitas, e não assumimos a responsabilidade de qualquer uso desta informação.

Nenhuma informação aqui contida deve ser considerada como uma licença para operação ou como recomendação para infringir nenhuma patente. Ao realizar a substituição dos fluidos refrigerantes, o desempenho dos equipamentos pode variar dependendo das condições de operação e projeto. Consulte sempre o fabricante dos equipamentos e a literatura técnica do fluido refrigerante.

Copyright© 2016. Opteon™ é uma marca registrada ou marca comercial da The Chemours Company FC, LLC.